中国科学院研究生院教材编审委员会

主　任：白春礼

顾　问：余翔林

副主任：马石庄（常务）刘志鹏 韩兴国 苏　刚

委　员(按姓氏笔划排列)：

石耀霖　李家春　李伯聪　李　佩　刘嘉麒　张文芝

张增顺　吴　向　汪尔康　汪寿阳　杨　乐　徐至展

阎保平　黄荣辉　黄　钧　彭家贵　裴　钢　谭铁牛

数学学科编审组

主　编：杨　乐

副主编：彭家贵

编　委：王世坤　李克正　李炳仁　陈希孺

邹国华　袁亚湘　曹礼群

总 序

在中国科学院研究生院和高等教育出版社的共同努力下，凝聚着中国科学院新老科学家、研究生导师们多年心血和汗水的中国科学院研究生院教材面世了。这套教材的出版，将对丰富我院研究生教育资源、提高研究生教育质量、培养更多高素质的科技人才起到积极的推动作用。

作为科技国家队，中国科学院肩负着面向国家战略需求，面向世界科学前沿，为国家作出基础性、战略性和前瞻性的重大科技创新贡献和培养高级科技人才的使命。中国科学院研究生教育是我国高等教育的重要组成部分，在新的历史时期，中国科学院研究生教育不仅要为我院知识创新工程提供人力资源保障，还担负着落实科教兴国战略和人才强国战略，为创新型国家建设培养一大批高素质人才的重要使命。

集成中国科学院的教学资源、科技资源和智力资源，中国科学院研究生院坚持教育与科研紧密结合的“两段式”培养模式，在突出科学教育和创新能力培养的同时，重视全面素质教育，倡导文理交融、理工结合，培养的研究生具有宽厚扎实的基础知识、敏锐的科学探索意识、活跃的思维和唯实、求真、协力、创新的良好素质。

研究生教材建设是研究生教育中重要的基础性工作。由一批活跃在科学前沿，同时又具有丰富教学经验的科学家编写的中国科

学院研究生院教材，适合在校研究生学习使用，也可作为高校教师和专业研究人员的参考书。这套研究生教材内容力求科学性、系统性、基础性和前沿性的统一，使学习者不仅能获得比较系统的科学基础知识，也能体会蕴于其中的科学精神、科学思想、科学方法，为进入科学研究的学术殿堂奠定良好的基础；优秀教材不但是体现教学内容和教学方法的知识载体、开展教学的基本条件和手段，也是深化教学改革、提高教育质量、促进科学教育与人文教育结合的重要保证。

“十年树木，百年树人”。我相信，经过若干年的努力，中国科学院研究生院一定能建设起多学科、多类型、多品种、多层次配套的研究生教材体系，为我国研究生教育百花园增添一枝新的奇葩，为我国高级科技人才的培养作出新的贡献。

中国科学院 常务副院长
中国科学院研究生院 院长
中国科学院 院士

二〇〇六年二月二十八日

前　言

在科学计算中经常要数值求解各类偏微分方程, 有限元、有限差分法和有限体积法是最重要的常用方法. 本书是作者在多年科研实践和教学经验的基础上, 为高年级大学生和研究生学习偏微分方程有限差分方法而编写的教材或教学参考书.

全书共分八章. 第一章是预备知识, 介绍一些重要基本概念和重要定理. 第二章介绍差分近似导数的各种方法, 及差分格式的 Fourier 误差分析. 第三章介绍差分格式的收敛性、相容性和稳定性的分析, 重点介绍稳定性分析的 Fourier 级数法和矩阵分析法. 第四章介绍椭圆型方程的差分方法, 包括基于变分原理的差分方法. 第五章介绍差分方程的迭代求解, 包括经典迭代方法、Krylov 子空间的各种迭代方法和多重网格法. 第六章介绍抛物型方程的差分方法, 包括算子形式的热传导方程. 第七章介绍双曲型方程的差分方法, 包括差分格式的耗散和频散分析、基于快速 Fourier 变换的伪谱法. 最后, 第八章对流体力学方程的重要差分方法作了简要介绍.

为适应不同专业, 特别是非计算数学或应用数学专业的需要, 本书尽量避免过多的数学理论, 叙述由浅入深, 力求翔实, 特别是关键性的步骤, 并配以较多的例题, 以使读者能更好地自学和掌握. 本书强调处理问题的一般性方法, 注重方法之间的内在联系和物理解释, 努力在课程学习与将来的课题研究之间架起一座桥梁, 使所学知识得以延伸, 或直接用于自己的研究, 或引向有关前沿课题的研究, 或启发更多更大的创新. 如能达到这些目标, 那正是作者所期望的.

本书内容丰富, 在教学中可选重点章节讲解, 其余留作自学. 读者也可根据自身专业需要, 侧重阅读相关内容. 阅读本书, 只要具备大学数学分析、数值线性代数的基础就不会有实质性困难.

作者在编写本书过程中, 参考了 Thomas 等国内外有关著作 (见参考文献), 这些

文献对本书反映最新成熟的成果是重要的, 为此作者衷心感谢这些文献的作者. 此外, 作者要感谢中国科学院数学与系统科学研究院、计算数学与科学工程计算研究所、计算数学与科学工程计算国家重点实验室的领导、老师和同事们的指导和帮助, 感谢高等教育出版社的大力支持和编辑们的辛勤劳动, 感谢国家重点项目 “数理方程反问题与应用” (No.10431030) 在科研中所给予的支持. 由于作者学识和经验不足, 时间紧促, 书中不当甚至错误恐怕难免, 希望读者批评指正.

作者

2006 年 6 月

郑重声明

高等教育出版社依法对本书享有专有出版权。任何未经许可的复制、销售行为均违反《中华人民共和国著作权法》，其行为人将承担相应的民事责任和行政责任，构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。为了维护市场秩序，保护读者的合法权益，避免读者误用盗版书造成不良后果，我社将配合行政执法部门和司法机关对违法犯罪的单位和个人给予严厉打击。社会各界人士如发现上述侵权行为，希望及时举报，本社将奖励举报有功人员。

反盗版举报电话：(010) 58581897/58581896/58581879

传　　真：(010) 82086060

E - mail：dd@hep.com.cn

通信地址：北京市西城区德外大街4号

高等教育出版社打击盗版办公室

邮　　编：100011

购书请拨打电话：(010)58581118

第一章　基础知识

§1.1 偏微分方程基本概念

许多物理现象或过程受多个因素的影响而按一定规律在变化, 描述这种现象或过程的数学形式常导致偏微分方程. 偏微分方程的一般形式是

$$F(x, y, \cdots, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \cdots, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \cdots) = 0$$

其中 $x, y, \cdots$ 是自变量, u 是未知函数, $\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \cdots$ 是 u 的偏导数. 一个偏微分方程中所出现的未知函数导数的最高阶数, 称为该方程的**阶**, 最高阶导数的幂次称为该方程的**次数**. 例如

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (\frac{\partial u}{\partial y})^3 = 2xy$$

是二阶一次偏微分方程, 而

$$(\frac{\partial u}{\partial x})^2 + 2\frac{\partial u}{\partial y} = 0$$

是一阶二次偏微分方程. 当遇到的是相互依赖的几个偏微分方程时, 先把所有方程合并成一个单独方程再确定. 例如下列方程中虽然每个都含有一阶导数, 但是二阶的, 即

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial z}$$

$$u = \frac{\partial w}{\partial x}$$

$$v = \frac{\partial w}{\partial y}$$

可以化为

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 w}{\partial y^2}=\frac{\partial^2 w}{\partial xy}$$

因而它是二阶的.

如果微分方程中各项关于未知函数及其各阶导数都是一次, 则称为**线性**的. 在线性微分方程中, 不带未知函数及其导数的项, 称为**自由项**. 当自由项不恒为零时, 方程称为**非齐次**的, 否则称为**齐次**的. 一个微分方程, 如果不是线性的, 但对未知函数的所有最高阶导数都是线性的, 则称为**拟线性**的; 不是线性又不是拟线性的方程, 称为**非线性**的. 例如考虑一阶方程

$$a\frac{\partial u}{\partial x}+b\frac{\partial u}{\partial y}=c$$

当系数 a,b,c 为常数或 x,y 的函数时, 方程是线性的; 若系数还是未知函数 u 的函数, 则是拟线性的; 若还是未知函数 u 的一阶偏导数的函数, 则是非线性的. 例如

$$y\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2xy\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+u=1$$

是二阶一次线性非齐次方程,

$$\frac{\partial u}{\partial x}+u\frac{\partial u}{\partial y}=x^2$$

是一阶一次拟线性非齐次方程,

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2=0$$

是一阶二次非线性齐次方程.

§1.1.1 方程的分类

考虑具有两个自变量的二阶偏微分方程

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2b\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+d\frac{\partial u}{\partial x}+e\frac{\partial u}{\partial y}+fu+g=0 \tag{1.1.1}$$

由上可知, 如果 a,b,c 是常数或只是 x 和 y 的函数, 则是线性的, 如果 a,b,c 是 $x,y,u,\frac{\partial u}{\partial x},\frac{\partial u}{\partial y}$ 的函数, 则是拟线性的, 其他情况都是非线性的. 下面是几个典型的二阶线性偏微分方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0 \qquad \text{Laplace 方程}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=f(x,y) \qquad \text{Poisson 方程}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \qquad \text{热传导方程}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \qquad \text{波动方程}$$

每一个具有两个自变量的二阶线性偏微分方程都可化成三种标准形式, 即**双曲型**、**抛物型**或**椭圆型**. 方程分类的方法有多种, 按系数 a, b, c 的关系, 可分为

$$\begin{aligned} &b^2 - ac > 0 \quad \text{双曲型方程} \\ &b^2 - ac = 0 \quad \text{抛物型方程} \\ &b^2 - ac < 0 \quad \text{椭圆型方程} \end{aligned}$$

因此, 波动方程是双曲型的, 热传导方程或扩散方程是抛物型的, Laplace 或 Poisson 方程是椭圆型的.

由于方程系数取值不同, 方程的类型也会发生变化, 如

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (1 - x^2 - y^2)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

在单位圆内是椭圆型, 在单位圆外是双曲型, 又如

$$y\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + x\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

当 $x > y$ 时为双曲型, 当 $x = 2y$ 时为抛物型, 当 $x < 2y$ 时为椭圆型.

§1.1.2 方程的特征线

下面我们将看到双曲型偏微分方程具有两簇实特征线, 抛物型偏微分方程具有一簇实特征线, 而椭圆型偏微分方程则无实特征线.

方程 (1.1.1) 的三种标准形式可用新变量 ξ 和 η 表示为

$$u_{\xi\xi} - u_{\eta\eta} + \cdots = 0 \quad \text{或} \quad u_{\xi\eta} + \cdots = 0 \quad \text{双曲型方程} \tag{1.1.2}$$

$$u_{\xi\xi} + \cdots = 0 \quad \text{抛物型方程} \tag{1.1.3}$$

$$u_{\xi\xi} + u_{\eta\eta} + \cdots = 0 \quad \text{椭圆型方程} \tag{1.1.4}$$

引入隐式变量变换

$$\xi = \phi(x, y), \quad \eta = \psi(x, y) \tag{1.1.5}$$

于是

$$\begin{aligned} &u_x = u_\xi \phi_x + u_\eta \psi_x \\ &u_y = u_\xi \phi_y + u_\eta \psi_y \\ &u_{xx} = u_{\xi\xi}\phi_x^2 + 2u_{\xi\eta}\phi_x\psi_x + u_{\eta\eta}\psi_x^2 + \cdots \\ &u_{xy} = u_{\xi\xi}\phi_x\phi_y + u_{\xi\eta}(\phi_x\psi_y + \phi_y\psi_x) + u_{\eta\eta}\psi_x\psi_y + \cdots \\ &u_{yy} = u_{\xi\xi}\phi_y^2 + 2u_{\xi\eta}\phi_y\psi_y + u_{\eta\eta}\psi_y^2 + \cdots \end{aligned} \tag{1.1.6}$$

将 (1.1.6) 式代入 (1.1.1) 式中, 得

$$au_{xx} + 2bu_{xy} + cu_{yy} = Au_{\xi\xi} + 2Bu_{\xi\eta} + Cu_{\eta\eta} + \cdots \tag{1.1.7}$$

其中

$$A = a\phi_x^2 + 2b\phi_x\phi_y + c\phi_y^2 \tag{1.1.8}$$

$$B = a\phi_x\psi_x + b(\phi_x\psi_y + \phi_y\psi_x) + c\phi_y\psi_y \tag{1.1.9}$$

$$C = a\psi_x^2 + 2b\psi_x\psi_y + c\psi_y^2 \tag{1.1.10}$$

由 (1.1.8)~(1.1.10) 式可得 a, b, c 与 A, B, C 之间有如下关系

$$B^2 - AC = (b^2 - ac)(\phi_x\psi_y - \phi_y\psi_x)^2 \tag{1.1.11}$$

显然, 在这一变量变换情形下, $b^2 - ac$ 的符号与 $B^2 - AC$ 的符号保持一致, 而且变换的 Jacobi 行列式 $\left|\dfrac{\partial(\phi,\psi)}{\partial(x,y)}\right| = \phi_x\psi_y - \phi_y\psi_x$ 必须非零. 现在考虑 $b^2 - ac > 0$ 的情形.

当 $b^2 - ac > 0$ 时, 方程 (1.1.1) 能变换成 (1.1.2) 式中的任一种, 我们考虑 $u_{\xi\eta} + \cdots = 0$ 的情况. 由 (1.1.7) 式知, 这需使 A, C 为零, 即

$$a\phi_x^2 + 2b\phi_x\phi_y + c\phi_y^2 = 0 \tag{1.1.12}$$

$$a\psi_x^2 + 2b\psi_x\psi_y + c\phi_y^2 = 0 \tag{1.1.13}$$

这两个方程的解分别为

$$\phi_x = \lambda_1\phi_y \tag{1.1.14}$$

$$\psi_x = \lambda_2\psi_y \tag{1.1.15}$$

其中 λ_1 和 λ_2 分别是方程 (1.1.12) 和 (1.1.13) 的特征根. (1.1.14)~(1.1.15) 式均为 ϕ 和 ψ 的一阶线性偏微分方程, 分别有特征线

$$\frac{dy}{dx} + \lambda_1 = 0 \tag{1.1.16}$$

$$\frac{dy}{dx} + \lambda_2 = 0 \tag{1.1.17}$$

沿这两簇特征线, $\xi = \phi(x, y)$ 和 $\eta = \psi(x, y)$ 为常数. 将 (1.1.16) 和 (1.1.17) 式分别代入 (1.1.14) 和 (1.1.15) 式中, 得

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\phi_x}{\phi_y}, \quad \frac{dy}{dx} = -\frac{\psi_x}{\psi_y}$$

再代入 (1.1.12) 式或 (1.1.13) 式中, 得

$$a(dy)^2 - 2bdxdy + c(dy)^2 = 0 \tag{1.1.18}$$

这是关于 $\frac{dy}{dx}$ 的二次方程, 所以

$$\frac{dy}{dx} = \frac{b \pm \sqrt{b^2 - ac}}{a} \tag{1.1.19}$$

由于 $b^2-ac>0$, 所以上式表示有两簇实特征线.

类似地可处理抛物型或椭圆型偏微分方程, 对抛物型方程, 有一个实根和一簇特征线, 这相当于 $\lambda_1=\lambda_2=-\dfrac{b}{a}$ 和 $\eta=\psi(x,y)$ 为常数; 对椭圆型方程, $b^2-ac<0$, 没有实数根.

对 n 个自变量 $(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 的二阶偏微分方程, 可写成如下形式

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i\partial x_j}+H=0 \tag{1.1.20}$$

其中 H 可以是 u 和 $\dfrac{\partial u}{\partial x_i}$ 的函数, 系数 a_{ij} 可以是自变量的函数. 与两个自变量的情况类似, 该方程可以根据矩阵 $A=(a_{ij})_{n\times n}$ 的特征值分类:

(1) 若有零特征值 (即 A 退化), 这时有 m 个特征曲面 $(1\leqslant m<n)$, 方程为**抛物型**.

(2) 若所有特征值不为零且为同号 (即 A 为正定或负定), 这时不存在实特征曲面, 方程**椭圆型**.

(3) 若所有特征值不为零且除一个特征值以外所有特征值同号 (即 A 不退化又不是正定或负定), 这时有 n 个实特征曲面, 方程为**双曲型**.

(4) 若所有特征值不为零, 且至少有两个特征值为正、两个特征值为负, 即为**超双曲型**方程.

与方程 (1.1.20) 相应的标准形式是

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}+H=0,\quad 0<m<n \qquad \text{椭圆型方程}$$

$$\sum_{i=1}^{n-m}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}+H=0,\quad 0<m<n \qquad \text{抛物型方程}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}-\sum_{i=2}^{n}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}+H=0 \qquad \text{双曲型方程}$$

$$\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}-\sum_{i=m+1}^{n}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}+H=0,\quad 1<m<n-2 \qquad \text{超双曲型方程}$$

§1.1.3 方程组的分类

经常会遇到偏微分方程组的情况如流体力学控制方程. n 个未函数 m 个自变量的一阶偏微分方程组可写成

$$\sum_{k=1}^{m}A^k\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x_k}=\boldsymbol{E} \tag{1.1.21}$$

其中 $\boldsymbol{u}=(u_1,u_2,\cdots,u_n)^T$ 为未知函数向量, $\boldsymbol{E}=(E_1,E_2,\cdots,E_n)^T$ 为右端项向量,

$A^k=(a_{ij}^k)_{n\times n}$ 是系数矩阵. 称行列式

$$\det(\sum_{k=1}^{m}A^k\lambda_k)=0 \tag{1.1.22}$$

为 (1.1.21) 的特征方程, $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m)$ 是特征面的法向量. 偏微分方程组 (1.1.21) 依据特征方程 (1.1.22) 的 n 个根 (特征根) 的分类为

(1) 若有 n 个不同的特征根 $\lambda_k(k=1,\cdots,n)$ 且都是实根, 则方程组是**双曲型**的.

(2) 若至多有 $n-1$ 个不同的实根且没有复数根, 则方程组是**抛物型**的.

(3) 若没有实根, 则方程组是**椭圆型**的.

有时既有实根又有复数根, 如果有复数根出现, 我们认为是椭圆型方程.

三个自变量的一阶偏微分方程组可写成

$$A\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x}+B\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial y}+C\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial z}=\boldsymbol{E}$$

其特征方程为

$$|A\lambda_x+B\lambda_y+C\lambda_z|=0$$

两个自变量的一阶偏微分方程组

$$A\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x}+B\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial y}=\boldsymbol{E} \tag{1.1.23}$$

的特征方程为

$$|A\lambda_x+B\lambda_y|=0 \tag{1.1.24}$$

这时 $\boldsymbol{\lambda}=\lambda_x\boldsymbol{i}+\lambda_y\boldsymbol{j}$ 是特征线的法线. 若令特征线方程为 $s(x,y)=0$, 则特征线斜率为 $\dfrac{dy}{dx}=-\dfrac{s_x}{s_y}=-\dfrac{\lambda_x}{\lambda_y}$. 于是 (1.1.24) 可写成常规形式

$$\left|A\frac{dy}{dx}-B\right|=0 \tag{1.1.25}$$

一般地, 可设 $m-1$ 维特征曲面 s 的方程为

$$s(x_1,x_2,\cdots,x_m)=0$$

则 $\lambda_i=\frac{\partial s}{\partial x_i}$ 是曲面 s 的法向分量.

考虑两个自变量两个未知函数的一阶偏微分方程组的情况, 其一般形式为

$$\begin{aligned}a_{11}\frac{\partial u}{\partial x}+a_{12}\frac{\partial v}{\partial x}+b_{11}\frac{\partial u}{\partial y}+b_{12}\frac{\partial v}{\partial y}=E_1\\ a_{21}\frac{\partial u}{\partial x}+a_{22}\frac{\partial v}{\partial x}+b_{21}\frac{\partial u}{\partial y}+b_{22}\frac{\partial v}{\partial y}=E_2\end{aligned} \tag{1.1.26}$$

可写成 (1.1.23) 的形式, 其中

$$A=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}b_{11} & b_{12}\\ b_{21} & b_{22}\end{bmatrix},\quad E=\begin{bmatrix}E_1\\ E_2\end{bmatrix}$$

由 (1.1.25) 知特征方程为

$$\begin{vmatrix}a_{11}\dfrac{dy}{dx}-b_{11} & a_{12}\dfrac{dy}{dx}-b_{12}\\ a_{21}\dfrac{dy}{dx}-b_{21} & a_{22}\dfrac{dy}{dx}-b_{22}\end{vmatrix}=0$$

即

$$(a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21})\left(\frac{dy}{dx}\right)^2-(a_{11}b_{22}-a_{21}b_{12}+a_{22}b_{11}-a_{12}b_{21})\frac{dy}{dx}+(b_{11}b_{22}-b_{21}b_{12})=0 \tag{1.1.27}$$

方程 (1.1.27) 有两个根, 方程 (1.1.26) 的分类由这两个根的情况确定. 记

$$\Delta=(a_{11}b_{22}-a_{21}b_{12}+a_{22}b_{11}-a_{12}b_{21})^2-4(a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21})(b_{11}b_{22}-b_{21}b_{12})$$

因此, 若 $\Delta<0$, 无实根, 方程为椭圆型, 若 $\Delta=0$, 只有一个实根, 方程为抛物型, 若 $\Delta>0$, 有两个实根, 方程为双曲型.

§1.1.4 定解条件

为了完全确定偏微分方程的解, 还需要给出适当的定解条件. 定解条件分初始条件和边界条件. 微分方程与定解条件一起构成定解问题. 定解问题可分三类:

(1) 初值问题: 只有初始条件而没有边界条件的定解问题, 也称为 **Cauchy 问题.**

(2) 边值问题: 只有边界条件而没有初始条件的定解问题.

(3) 混合问题: 既有初始条件又有边界条件的定解问题, 有时也称为初边值问题.

一般说来, 边界条件具有下列形式

$$\alpha(x,y)u(x,y)+\beta(x,y)\frac{\partial u}{\partial n}(x,y)=\gamma(x,y)$$

其中 $\frac{\partial u}{\partial n}$ 为边界的外法向导数. 有如下几种特殊形式

(1) Dirichlet (第一类) 条件: $\beta=0$, 即 u 值给定.

(2) Neumann (第二类) 条件: $\alpha=0$, 即 u 的外法向导数给定.

(3) Robbins (第三类) 条件: $\alpha\neq0$, $\beta\neq0$.

(4) Cauchy 条件: 有两个方程, 在一个方程中, $\beta=0$, u 值给定; 在另一个方程中, $\alpha=0$, u 的外法向导数给定.

通常双曲型方程与 Cauchy 条件有关, 抛物型方程与 Dirichlet 或 Neumann 条件有关, 椭圆型方程与 Dirichlet 或 Neumann 条件相关. 下表是常见的三类方程的基本性质.

表 1.1 常见三类方程定解问题的性质

描述的问题	方程类型	方程形式	定解条件	求解区域	解的光滑性
平衡问题	椭圆型	$\text{divgrad}u = 0$	边界条件	闭区域	解恒光滑
与耗散有关的问题	抛物型	$\dfrac{\partial u}{\partial t} = \alpha\text{divgrad}u$	初边值条件	开区域	解恒光滑
与耗散无关的问题	双曲型	$\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2\alpha\text{divgrad}u$	初边值条件	开区域	解可不连续

§1.2 矩阵的基本概念

在用差分法数值求解偏微分方程的过程中, 微分方程经常被一个线性代数方程组所代替. 下面简要地介绍矩阵的一些重要概念和性质.

线性代数方程组

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{1.2.1}$$

可以写成矩阵形式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1.2.2}$$

其中 A 是 n 阶方阵, 元素为 $a_{ij}(i, j = 1, 2, \cdots, n)$, 是实数. 向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 均为 n 维列向量.

对矩阵 A, 记 A^{-1} 为 A 的逆, A^T 为 A 的转置, $|A|$ 为 A 的行列式, 也常记为 $\det(A)$. 记 Π 为**置换矩阵**, 即矩阵的元数仅为 0 和 1, 在每行和每列仅有一个非零元素.

对矩阵 $A = (a_{ij})$, 若 $|A| \neq 0$, 则称 A 为**非奇异矩阵**; 若 $A = A^T$, 则称 A 为**对称矩阵**; 若 $A^{-1} = A^T$, 则称 A 为**正交矩阵**; 若 $a_{ij} = 0(i, j = 1, 2, \cdots, n)$, 则称 A 为**零矩阵**; 若 $a_{ij} = 0(i \neq j)$, 则称 A 为**对角矩阵**; 若 $|a_{ii}| \geqslant \sum\limits_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$ 对任何 i 都成立, 则称 A 为**对角占优**; 若 $|a_{ii}| > \sum\limits_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$ 对任何 i 都成立, 则称 A 为**严格对角占优**; 若 $a_{ij} = 0$, 当 $|i - j| > 1$, 则称 A 为**三对角矩阵**; 若 $a_{ij} = 0(i > j)$, 则称 A 为**上三角阵**; 若 $a_{ij} = 0(j > i)$, 则称 A 为**下三角阵**; 若 $A = A^H$(H 表示复共轭转置), 则称 A 为 **Hermite 矩阵**; 若 $AA^H = A^HA = I$, 则称 A 为**酉矩阵**; 若 $AA^H = A^HA$, 则称 A 为**正规矩阵**. 若不存在置换变换 $\Pi A \Pi^{-1}$, 使得 A 简化为

$$\begin{bmatrix} P & O \\ R & Q \end{bmatrix}$$

其中 P 和 Q 分别是 p 阶和 q 阶方阵, $p + q = n$, O 是 $p \times q$ 零矩阵, 则称矩阵 A 不

可约. 若

$$A = \begin{bmatrix} B_1 & & & \\ & B_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & B_s \end{bmatrix}$$

其中 $B_k(k=1,2,\cdots,s)$ 是方阵, 阶数不必相等, 则称 A 为**块对角阵**.

A 的**特征方程**是 $|A-\lambda I|=0$. A 的**特征值**是特征方程的根 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,n)$. 对每个 λ_i, **右特征向量** $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 由公式

$$A\boldsymbol{x}^{(i)} = \lambda_i \boldsymbol{x}^{(i)}, \quad \boldsymbol{x}^{(i)} \neq 0$$

给出, **左特征向量** $\boldsymbol{y}^{(i)}$ 由下式

$$\boldsymbol{y}^{(i)T} A = \lambda_i \boldsymbol{y}^{(i)T} \quad \text{或} \quad A^T \boldsymbol{y}^{(i)} = \lambda_i \boldsymbol{y}^{(i)}, \quad \boldsymbol{y}^{(i)} \neq 0$$

给出. 一般地, 在复数域, 左特征向量 $\boldsymbol{y}^{(i)}$ 由公式

$$\boldsymbol{y}^{(i)H} A = \lambda_i \boldsymbol{y}^{(i)H}$$

给出. 通常指的特征向量即右特征向量.

两个矩阵 A 和 B 称为**相似**, 若对某非奇异矩阵 S, 有 $B=S^{-1}AS$. $S^{-1}AS$ 是 A 的**相似变换**. 相似矩阵的行列式相等. 若存在酉矩阵 U, 使得 $U^HAU=U^{-1}AU=B$, 则称 A 酉相似于 B.

由正规矩阵的定义知, 对角阵、实对称矩阵、正交矩阵、Hermit 矩阵、酉矩阵都是正规矩阵.

例 1 若 $\boldsymbol{x}^{(i)}(i=1,2,\cdots,n)$ 是 A 的特征向量, $\boldsymbol{y}^{(j)}(j=1,2,\cdots,n)$ 是 A^T 的特征向量, 则

$$\boldsymbol{x}^{(i)T}\boldsymbol{y}^{(j)} = 0, \quad \lambda_i \neq \lambda_j$$

其中 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,n)$ 是 A 的特征值.

证明 A^T 的特征值由下式给出

$$|A^T - \lambda I| = 0$$

因为 A^T 的特征值与 A 相同, 所以相应于 λ_j 的特征向量 $\boldsymbol{y}^{(j)}$ 满足

$$A^T \boldsymbol{y}^{(j)} = \lambda_j \boldsymbol{y}^{(j)} \tag{1.2.3}$$

两边转置后得

$$\boldsymbol{y}^{(j)T} A = \lambda_j \boldsymbol{y}^{(j)T} \tag{1.2.4}$$

其中 $\boldsymbol{y}^{(j)}$ 是 A 的左特征向量.

另外

$$A\boldsymbol{x}^{(i)} = \lambda_i \boldsymbol{x}^{(i)}$$

两边转置后得

$$\boldsymbol{x}^{(i)^T} A^T = \lambda_i \boldsymbol{x}^{(i)^T} \tag{1.2.5}$$

方程 (1.2.5) 右乘 $\boldsymbol{y}^{(j)}$ 及方程 (1.2.3) 左乘 $\boldsymbol{x}^{(i)^T}$ 且两式相减, 得

$$0 = (\lambda_i - \lambda_j)\boldsymbol{x}^{(i)^T}\boldsymbol{y}^{(j)}$$

若 $\lambda_i \neq \lambda_j$, 则

$$\boldsymbol{x}^{(i)^T}\boldsymbol{y}^{(j)} = 0$$

□

例 2 证明一个矩阵的特征值在相似变换下不变.

证明 若 $A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x} \neq 0$, 则

$$S^{-1}A\boldsymbol{x} = \lambda S^{-1}\boldsymbol{x} \quad (|S| \neq 0)$$

从而

$$S^{-1}ASS^{-1}\boldsymbol{x} = \lambda S^{-1}\boldsymbol{x}$$

因此

$$(S^{-1}AS)S^{-1}\boldsymbol{x} = \lambda S^{-1}\boldsymbol{x}$$

式中 $S^{-1}AS$ 即为 A 的相似变换. 因此特征值不变, 特征向量被乘以 S^{-1}.

□

例 3 若矩阵 A 的特征值相异, 证明存在一个相似变换, 该变换将 A 化简为对角形式且列为 A 的特征向量.

证明 设 A 的 n 个相异特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$, 所对应的线性无关特征向量为 $\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}^{(n)}$, A^T 的特征值 λ_i, $i = 1, 2, \cdots, n$, 所对应的线性无关特征向量为 $\boldsymbol{y}^{(i)}, i = 1, 2, \cdots, n$. 则有

$$\boldsymbol{y}^{(j)^T}\boldsymbol{x}^{(i)} = 0, \quad i \neq j$$

且使所选的 $\boldsymbol{y}^{(i)}$ 满足

$$\boldsymbol{y}^{(i)^T}\boldsymbol{x}^{(i)} = 1, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

这些关系蕴含第 j 行为 $\boldsymbol{y}^{(j)^T}$ 的矩阵 Y^T 是第 i 列为 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 的矩阵 X 的逆. 因

$$A\boldsymbol{x} = x\mathrm{diag}(\lambda_i)$$

又 Y^T 是 X 的逆, 所以

$$X^{-1}AX = Y^TAX = \mathrm{diag}(\lambda_i)$$

结论得证.

□

§1.3 矩阵重要性质与定理

首先介绍矩阵的一些重要性质, 然后介绍矩阵的一些重要定理. 这些结果在稳定性分析中经常会遇到.

A 的 Jordan 子矩阵 (Jordan 块) 是一个如下的矩阵形式

$$J_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & & & \\ 1 & \lambda_i & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & \lambda_i \end{bmatrix}$$

其中 λ_i 是 A 的特征值. A 的Jordan **标准形** 是由 Jordan 块构成的分块对角矩阵, 它是唯一的块排列方式. 任何矩阵 A 可以通过相似变换 S 被简化成 Jordan 标准形

$$J = S^{-1}AS$$

其中 J 的对角元是 A 的特征值.

假如 A 有 n 个相异特征值, 则它的 Jordan 标准形是对角形式, 且它的 n 个特征向量是线性无关的, 它们形成一个完备的特征向量系并张成 n 维空间. 假如 A 没有 n 个相异特征值, 可以有或没有 n 个无关的特征向量. 若任何两个矩阵 A 和 B 可交换, 并有对角 Jordan 形式, 则它们有一个完全的联合特征向量.

一个 n 阶对称矩阵有: (1) 一个对角 Jordan 标准型; (2) n 个实特征值; (3) n 个相互正交的特征向量. 假如 A 和 B 是对称的, 且 $AB = BA$, 则 AB 是对称的.

为讨论正定矩阵, 先定义 n 维向量空间中两个向量 (可以是复向量) $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 和 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)$ 的内积

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i \bar{y}_i$$

其中 $\bar{y}_i$ 是 y_i 的复共轭. 显然, 对任意 n 阶复矩阵 A, 有 $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}) = (A^H\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 成立.

若 A 是实矩阵, $\boldsymbol{x}$ 是复向量, 则 A 是**正定**的当

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) > 0$$

对所有的 $\boldsymbol{x} \neq 0$ 成立. 当 A 正定时, 则 A 是对称的. 注意 $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ 是实数.

若 A 是实矩阵, $\boldsymbol{x}$ 是实向量, 则 A 是正定的当

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) > 0$$

对所有 $\boldsymbol{x} \neq 0$ 成立, 这时 A 不一定对称.

矩阵 A 是**半正定的**, 若

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) \geqslant 0$$

其中等号至少对一个 $\boldsymbol{x} \neq 0$ 成立.

例 4 设 A 为实矩阵, 若对所有复向量 $\boldsymbol{x}$, $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) > 0$, 则 A 是对称的.

证明 设 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{a} + \mathrm{i}\boldsymbol{b}$, 其中 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 为实向量, 考虑内积

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) &= (\boldsymbol{a} + \mathrm{i}\boldsymbol{b}, A(\boldsymbol{a} + \mathrm{i}\boldsymbol{b})) \\ &= (\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{a}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{b}, A\boldsymbol{a}) - \mathrm{i}(\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{b}) + (\boldsymbol{b}, A\boldsymbol{b}) \\ &= [(\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{a}) + (\boldsymbol{b}, A\boldsymbol{b})] - \mathrm{i}[(\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{b}) - (\boldsymbol{b}, A\boldsymbol{a})] > 0\end{aligned}$$

这仅当

$$(\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{b}) - (\boldsymbol{b}, A\boldsymbol{a}) = (\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{b}) - (\boldsymbol{a}, A^T\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a}, (A - A^T)\boldsymbol{b}) = 0$$

才可能. 因此

$$A = A^T$$

即 A 对称.

□

例 5 若 A 是实对称正定矩阵, 则它的所有特征值都为正.

证明 因 A 是实对称矩阵, 所以 A 有实特征值, 也即有实特征向量. 因此对任何特征向量 $\boldsymbol{x} \neq 0$, 均有

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, \lambda\boldsymbol{x}) = \lambda(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$$

但因为 A 是正定的和实的, 所以

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) > 0$$

从而

$$\lambda = \frac{(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})} > 0$$

□

例 6 设 A 是实矩阵, 证明 A^TA 有非负特征值.

证明 设 $B = A^TA$, 则易知 B 是对称的. 因此 B 有实特征值, 对应的特征向量可取成实特征向量. 对任何非零向量 $\boldsymbol{x}$,

$$(\boldsymbol{x}, B\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, A^TA\boldsymbol{x}) = (A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) \geqslant 0$$

因此 B 是半正定的, 根据上一例, A^TA 有非负特征值. □

§1.3.1 三对角矩阵特征值

定理 1.3.1 若 A 是一个 N 阶三对角矩阵

$$\begin{bmatrix} a & b & & & \\ c & a & b & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c & a & b \end{bmatrix}_{N\times N}$$

其中 a,b,c 是实数, $bc>0$, 则 A 的右特征值为

$$\lambda_s = a + 2b\sqrt{\frac{c}{b}}\cos\frac{s\pi}{N+1}, \quad s=1,2,\cdots,N$$

对应的右特征向量是

$$x_s = (x_j)_s = (\frac{c}{b})^{\frac{j}{2}}\sin(\frac{js\pi}{N+1}), \quad j,s=1,2,\cdots,N$$

右特征向量构成右特征矩阵的列 $(s=1,\cdots,N)$, 矩阵元素为

$$X = (x_{js}) = (\frac{c}{b})^{\frac{j}{2}}\sin(\frac{js\pi}{N+1}), \quad j,s=1,2,\cdots,N$$

左特征值为

$$\gamma_s = a + 2c\sqrt{\frac{b}{c}}\cos\frac{s\pi}{N+1}, \quad s=1,2,\cdots,N$$

左特征向量为

$$y_s = (y_j)_s = \frac{2}{N+1}(\frac{c}{b})^{\frac{j}{2}}\sin(\frac{js\pi}{N+1}), \quad j,s=1,2,\cdots,N$$

左特征向量构成左特征值矩阵的行 $(s=1,\cdots,N)$, 矩阵元素为

$$Y = X^{-1} = (y_{sj}) = \frac{2}{N+1}(\frac{b}{c})^{\frac{j}{2}}\sin(\frac{js\pi}{N+1}), \quad j,s=1,2,\cdots,N$$

证明 设 λ 为矩阵 A 的右特征值, $x=(x_1,x_2,\cdots,x_N)^T$ 为相应的右特征向量, 则有

$$Ax=\lambda x$$

若定义 $x_0=x_{N+1}=0$, 则上式可写成如下统一的差分方程形式

$$cx_{j-1}+(a-\lambda)x_j+bx_{j+1}=0, \quad j=1,\cdots,N \tag{1.3.1}$$

这是一个齐次常系数线性差分方程, 其通解为

$$x_j = C_1\mu_1^j + C_2\mu_2^j \tag{1.3.2}$$

其中 C_1, C_2 为待定常数, μ_1, μ_2 是差分方程 (1.3.1) 的特征方程

$$b\mu^2 + (a-\lambda)\mu + c = 0 \tag{1.3.3}$$

的两个根. 注意 $\mu_1 \neq \mu_2$, 因为若 $\mu_1 = \mu_2$, 则通解为

$$x_j = (C_1 + C_2)\mu_1^j, \quad j = 1, \cdots, N$$

再由条件 $x_0 = x_{N+1} = 0$ 知 $C_1 = C_2 \equiv 0$, 从而 $x_j = 0$, 这导致特征向量为零, 不可能.

现对 (1.3.2) 式利用条件 $x_0 = x_{N+1} = 0$, 可得

$$C_1 + C_2 = 0, \quad C_1\mu_1^{N+1} + C_2\mu_2^{N+1} = 0$$

由该两式可解得

$$(\frac{\mu_1}{\mu_2})^{N+1} = 1$$

所以

$$\frac{\mu_1}{\mu_2} = e^{\mathrm{i}\frac{2s\pi}{N+1}}, \quad s = 1, \cdots, N \tag{1.3.4}$$

其中 $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$. 由方程 (1.3.3), 根据根与系数的关系, 有

$$\mu_1\mu_2 = \frac{c}{b}, \quad \mu_1 + \mu_2 = \frac{\lambda - a}{b} \tag{1.3.5}$$

由 (1.3.4) 式与 (1.3.5) 式的第一式联立可解得

$$\mu_1 = (\frac{c}{b})^{\frac{1}{2}} e^{\mathrm{i}\frac{s\pi}{N+1}}, \quad \mu_2 = (\frac{c}{b})^{\frac{1}{2}} e^{-\mathrm{i}\frac{s\pi}{N+1}}, \quad s = 1, \cdots, N$$

将上两式代入 (1.3.5) 式中第二式, 得右特征值 λ_s 为

$$\lambda_s = a + b(\frac{c}{b})^{\frac{1}{2}}(e^{\mathrm{i}\frac{s\pi}{N+1}} + e^{-\mathrm{i}\frac{s\pi}{N+1}}) = a + 2b(\frac{c}{b})^{\frac{1}{2}}\cos\frac{s\pi}{N+1}, \quad s = 1, \cdots, N \tag{1.3.6}$$

将 (1.3.6) 式代入 (1.3.2) 式得相应于右特征值 λ_s 的右特征向量 $\boldsymbol{x}_j$ 的分量

$$\begin{aligned} x_{js} &= C_1\mu_1^j + C_2\mu_2^j \\ &= C_1(\frac{c}{b})^{\frac{j}{2}}(e^{\mathrm{i}\frac{js\pi}{N+1}} - e^{-\mathrm{i}\frac{js\pi}{N+1}}) \\ &= 2\mathrm{i}C_1(\frac{c}{b})^{\frac{j}{2}}\sin\frac{js\pi}{N+1}, \quad j, s = 1, \cdots, N \end{aligned} \tag{1.3.7}$$

不记常数因子 $2\mathrm{i}C_1$, 得相应于特征值 λ_s 的右特征向量为

$$\boldsymbol{x}_s = (x_j)_s = (\frac{c}{b})^{\frac{j}{2}} \sin \frac{js\pi}{N+1}, \quad j, s = 1, \cdots, N$$

由右特征向量构成右特征矩阵的列

$$X = (x_{js}) = (\frac{c}{b})^{\frac{j}{2}} \sin \frac{js\pi}{N+1}, \quad j, s = 1, \cdots, N$$

左特征值的情况完全类似. 设 γ_s 为 A 的左特征值, 对应的左特征向量为 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_N)^T$, 则有

$$\boldsymbol{y}^T A = \gamma \boldsymbol{y}^T$$

若令 $y_0 = y_{N+1} = 0$, 则上式可写成一个齐次常系数线性差分方程

$$by_{j-1} + (1-\gamma)y_j + cy_{j+1} = 0, \quad j = 1, \cdots, N$$

按照前面类似的推导, 可解得左特征值为

$$\gamma_s = a + 2c(\frac{b}{c})^{\frac{1}{2}} \cos \frac{js\pi}{N+1}, \quad s = 1, \cdots, N$$

及相应的左特征向量的分量为

$$y_{js} = 2\mathrm{i}C_1(\frac{b}{c})^{\frac{j}{2}} \sin \frac{sj\pi}{N+1}, \quad j, s = 1, \cdots, N$$

若取常数 $C_1 = \dfrac{1}{N+1}$, 并去掉因子虚数单位 i, 则得与左特征值 γ_s 相应的左特征向量为

$$\boldsymbol{y}_s = (y_j)_s = \frac{2}{N+1}(\frac{b}{c})^{\frac{j}{2}} \sin \frac{js\pi}{N+1}, \quad j, s = 1, \cdots, N$$

可以验证, 由该左特征向量构成的左特征矩阵 $Y = (y_{sj})$ 与右特征矩阵 $X = (x_{js})$ 有如下关系

$$Y = X^{-1}$$

□

定理 1.3.2 (1) 三对角矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}_{N \times N}$$

的特征值为

$$\lambda_s = 2 - 2\cos\frac{(2s-1)\pi}{2N+1}, \quad s = 1, \cdots, N$$

特征向量为

$$u_k = \cos\frac{(2s-1)\pi x_k}{2}, \quad x_k = \frac{2k-1}{2N+1}, \quad k, s = 1, \cdots, N$$

(2) 三对角矩阵

$$\begin{bmatrix} 2 & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}_{N\times N}$$

的特征值为

$$\lambda_s = 2 - 2\cos\frac{(2s-1)\pi}{2N}, \quad s = 1, \cdots, N$$

特征向量为

$$u_k = \cos\frac{(2s-1)\pi x_k}{2}, \quad x_k = \frac{k-1}{N}, \quad k, s = 1, \cdots, N$$

(3) 三对角矩阵

$$\begin{bmatrix} 2 & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -2 & 2 \end{bmatrix}_{N\times N}$$

的特征值为

$$\lambda_s = 2 - 2\cos\frac{(2s-1)\pi}{N-1}, \quad s = 1, \cdots, N$$

特征向量为

$$u_k = \cos((2s-1)\pi x_k), \quad x_k = \frac{k-1}{N-1}, \quad k, s = 1, \cdots, N$$

该证明作为练习, 读者自己完成.

§1.3.2 矩阵特征值估计及非奇异性判定

定理 1.3.3 (Geršchgorin 圆盘定理) 矩阵 $A \in C^{n\times n}$ 的特征值位于复平面上 n 个圆盘的并集中

$$|\lambda - a_{ss}| \leqslant \sum_{j=1,j\neq s}^{n} |a_{sj}|, \quad s = 1, 2, \cdots, n$$

证明 设 λ 是 A 的一个特征值, $\boldsymbol{u}$ 是相应的特征向量. 令 $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \cdots, u_n)^T$. 选择 s, 使得 $|u_s| \geqslant |u_j|(j = 1, \cdots, n)$. 因为 λ 是特征值, $\boldsymbol{u}$ 是对应的特征向量, 所以

$$A\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{u} \tag{1.3.8}$$

假如方程 (1.3.8) 的 s 行除以 u_s, 则得

$$\lambda = a_{s1}\frac{u_1}{u_s} + a_{s2}\frac{u_2}{u_s} + \cdots + a_{ss} + \cdots + a_{sn}\frac{u_n}{u_s} \tag{1.3.9}$$

在 (1.3.9) 式两边减去 a_{ss}, 并取绝对值, 再利用三角不等式, 得

$$\lambda = a_{s1}\frac{u_1}{u_s} + a_{s2}\frac{u_2}{u_s} + \cdots + a_{ss} + \cdots + a_{sn}\frac{u_n}{u_s}$$

这即是要证明的结论.

□

Geršchgorin 圆盘定理给出了特征值所在的范围, 但并不说明每个圆中都有特征值, 例如矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 10 & 8 \\ 5 & 0 \end{bmatrix}$$

的特征值为 $5 \pm \mathrm{i}\sqrt{15}$, 均在圆盘 $G_1 = \{z: |z - 10| \leqslant 8\}$ 中, 而在 $G_2 = \{z: |z| \leqslant 5\}$ 中无特征值.

定义 1.3.1 设矩阵 $A \in C^{n\times n}$, 特征值为 $\lambda_i(1 \leqslant i \leqslant n)$, 则

$$\rho(A) = \max_i |\lambda_i|$$

称为矩阵 A 的谱半径.

一般地, $\rho(A)$ 是复平面中中心在原点, 包含 A 的所有特征值的最小圆盘的半径. 由 Geršchgorin 定理 1.3.3 得

$$\rho(A) = \min\left(\max_i \sum_j |a_{ij}|; \max_j \sum_i |a_{ij}|\right)$$

定理 1.3.4 (Taussky) 设矩阵 $A \in (a_{ij}) \in C^{n\times n}$ 是严格对角占优矩阵, 则 A 非奇异.

证明 设 A 是 (行) 严格对角占优, 即

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \cdots, n \tag{1.3.10}$$

由 Gerščhgorin 圆盘定理知, 对 A 的任一特征值 λ, 一定存在一个圆盘, 例如

$$G_i(A) = \left\{ |z - a_{ii}| \leqslant \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}| \right\} \tag{1.3.11}$$

使得 $\lambda \in G_i(A)$. 这说明 $\lambda \neq 0$, 即 $G_i(A)$ 不含原点 $z = 0$. 否则 (1.3.11) 式与 (1.3.10) 式矛盾. 再注意到性质 $\det(A) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i$, 知 A 非奇异.

□

引理 1.3.1 设 $A = (a_{ij}) \in C^{n\times n}$, λ 是 A 的特征值且满足

$$|\lambda - a_{ii}| \geqslant \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \cdots, n$$

设

$$Ax = \lambda x, \quad x = (x_1, \cdots, x_n)^T \neq 0$$

p 是一个指标使得

$$|x_p| = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i| = \|x\|_\infty \neq 0$$

则 (1) 如果 k 是使 $|x_k| = |x_p|$ 成立的任一指标, 则

$$|\lambda - a_{kk}| \geqslant \sum_{j=1,j\neq k}^{n} |a_{kj}|$$

也即 A 的第 k 个 Gerščhgorin 圆通过 λ.

(2) 如果对某个 $k(k = 1, \cdots, n)$, 有 $|x_k| = |x_p|$ 及 $a_{kj} \neq 0 (j \neq k)$, 则 $|x_j| = |x_p|$.

证明 (1) 根据假设, 有

$$(\lambda - a_{ii})x_i = \sum_{j=1,j\neq i}^{n} a_{ij}x_j, \quad i = 1, \cdots, n$$

所以

$$\begin{aligned} |\lambda - a_{ii}||x_i| &= \left| \sum_{j=1,j\neq i}^{n} a_{ij}x_j \right| \leqslant \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}x_j| \leqslant \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}||x_j| \\ &\leqslant \left(\sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}| \right) |x_p|, \quad i = 1, \cdots, n \end{aligned} \tag{1.3.12}$$

假如 k 是使 $|x_k| = |x_p|$ 成立的指标, 必有

$$(\lambda - a_{kk})x_i \leqslant \sum_{j=1, j\neq k}^{n} |a_{kj}|$$

但根据假定

$$(\lambda - a_{ii})x_i \geqslant \sum_{j=1, j\neq k}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \cdots, n$$

从而结论 (1) 成立.

(2) 因为 k 使得 $|x_k| = |x_p|$, 由结论 (1) 知, k 使得 (1.3.12) 式取等号, 即

$$|\lambda - a_{kk}||x_k| = \sum_{j=1, j\neq k}^{n} |a_{kj}||x_j| = \sum_{j=1, j\neq k}^{n} |a_{kj}||x_k|$$

右边的等式即有

$$\sum_{j=1, j\neq k}^{n} |a_{kj}|(|x_k| - |x_j|) = 0 \tag{1.3.13}$$

因为每一项非负, 且 $a_{kj} \neq 0 (j \neq 0)$, 故对其他 j, 也有 $|x_j| = |x_p|$.

□

定理 1.3.5 设 $A = (a_{ij}) \in C^{n\times n}$, λ 是 A 的特征值且是

$$G(A) = \bigcup_{i}^{n} G_i(A) = \bigcup_{i}^{n} \left\{ z: \ |z - a_{ii}| \leqslant \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}| \right\}, \quad z \in \mathbf{C}$$

的边界点, 也即满足不等式

$$|\lambda - a_{ii}| \geqslant \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \cdots, n$$

且 A 的所有元素不为零, 则 (1) A 的每个 Geršchgorin 圆通过 λ. (2) 如果 $A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_n) \neq 0$, 则 $|x_1| = \cdots = |x_n|$.

证明 设 $|x_p| = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i|$. 由引理 1.3.1 推得, $\sum\limits_{j=1, j=p}^{n} |a_{pj}|(|x_p| - |x_j|) = 0$. 又 A 的所有元素不为 0, $|x_p| = |x_j|$, 从而结论 (2) 成立. 再次利用引理 1.3.1 中的第一个结论, 知

$$|\lambda - a_{kk}| = \sum_{j=1, j\neq k}^{n} |a_{kj}|, \quad k = 1, \cdots, n$$

也即 A 的每个 Geršchgorin 圆通过 λ.

□

定理 1.3.6 (Brauer) 矩阵 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$ 的所有特征值位于 $\frac{n(n-1)}{2}$ 个 Cassini 卵形的并集

$$\bigcup_{i,j=1,i\neq j}\{z:|z-a_{ii}||z-a_{jj}|\leqslant R_iR_j\} \tag{1.3.14}$$

中, 这里 $R_i=\sum\limits_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|$.

证明 设 λ 是 A 的特征值. $\boldsymbol{x}=\{x_i\}\neq 0$ 是特征向量, 满足 $A\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$. 假设 x_p 是 $|x_i|$ 中的最大值, 即 $x_p\neq 0\geqslant|x_i|$ $(i=1,\cdots,n)$. 若 $\boldsymbol{x}$ 的所有其他分量为 0, 则 $A\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$ 意味 $a_{pp}=\lambda$. 因为 A 的所有对角元素在并集中, 所以当与 λ 相应的特征向量 $\boldsymbol{x}$ 仅有一个非零元素时, λ 也必在该并集中.

现假定特征向量 $\boldsymbol{x}$ 的分量至少有两个非零元素, 并设 x_q 是除 x_p 之外的最大值, 也即 $|x_p|\geqslant|x_q|\geqslant|x_i|$ $(i=1,\cdots,n,i\neq p)$, 且 $x_p\neq 0,x_q\neq 0$, 则 $A\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$ 蕴含

$$x_p(\lambda-a_{pp})=\sum_{j=1,j\neq p}^{n}a_{pj}x_j$$

于是

$$|x_p||\lambda-a_{pp}|=\left|\sum_{j=1,j\neq p}^{n}a_{pj}x_j\right|\leqslant\sum_{j=1,j\neq p}^{n}|a_{pj}||x_j|\leqslant\sum_{j=1,j\neq p}^{n}|a_{pj}||x_q|=R_p|x_q|$$

或

$$|\lambda-a_{pp}|\leqslant R_p\frac{|x_q|}{|x_p|} \tag{1.3.15}$$

同理, 我们有

$$x_q(\lambda-a_{qq})=\sum_{j=1,j\neq q}^{n}a_{qj}x_j$$

从而

$$|x_q||\lambda-a_{qq}|=\left|\sum_{j=1,j\neq q}^{n}a_{qj}x_j\right|\leqslant\sum_{j=1,j\neq q}^{n}|a_{qj}||x_j|\leqslant\sum_{j=1,j\neq p}^{n}|a_{pj}||x_p|=R_q|x_p|$$

或

$$|\lambda-a_{qq}|\leqslant R_q\frac{|x_p|}{|x_q|} \tag{1.3.16}$$

由 (1.3.15) 式乘 (1.3.16) 式, 得

$$|\lambda-a_{pp}|\cdot|\lambda-a_{qq}|\leqslant R_pR_q \tag{1.3.17}$$

也即 λ 在并集 (1.3.14) 中. □

推论 1.3.1 若 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$ 对所有 $i,j=1,\cdots,n(i\neq j)$ 满足

$$|a_{ii}|\cdot|a_{jj}|>R_iR_j \tag{1.3.18}$$

则 A 非奇异.

证明 设 λ 是 A 的一个特征值, 则由 Brauer 定理 1.3.6 知, λ 必位于 A 的 Cassini 卵形中, 即

$$|\lambda-a_{ii}|\cdot|\lambda-a_{jj}|\leqslant R_iR_j \tag{1.3.19}$$

若 $\lambda=0$, 则 $|a_{ii}|\cdot|a_{jj}|\leqslant R_iR_j$, 这与已知条件矛盾. 故 $\lambda\neq 0$, 从而 A 非奇异.

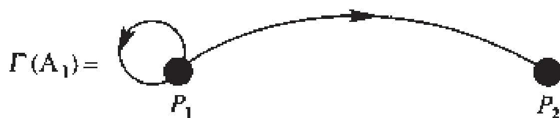
□

注意若 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$ 严格对角占优, 则满足条件 (1.3.18) 式, 从而 A 非奇异, 这就是定理 1.3.4.

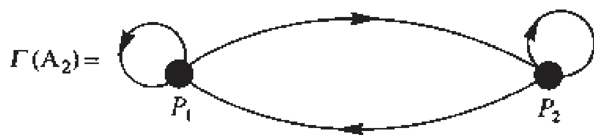
在差分方程中, 常常出现对角占优 (非严格) 矩阵. 如果矩阵不可约对角占优, 则非奇异, 稍后我们将证明这一结论. 现在讨论不可约性.

矩阵的不可约性可通过矩阵的**有向图**来判断. 矩阵 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$ 的有向图 $\Gamma(A)$ 是指对 n 个结点 $P_1,P_2,\cdots,P_n$ 当且仅当 $a_{ij}\neq 0$ 时用 P_i 到 P_j 的有向线段相连而形成的图形. 例

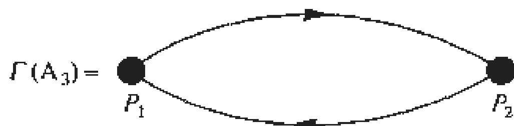
$$A_1=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix} \tag{1.3.20}$$



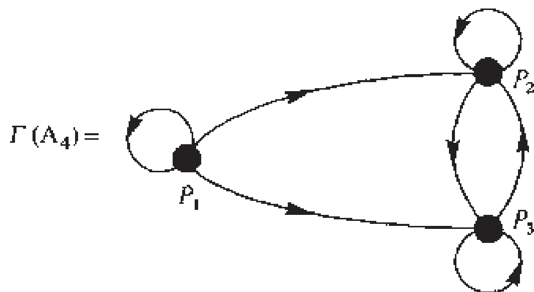
$$A_2=\begin{bmatrix}2 & 2\\ 2 & 2\end{bmatrix} \tag{1.3.21}$$



$$A_3=\begin{bmatrix}0 & 3\\ 3 & 0\end{bmatrix} \tag{1.3.22}$$



$$A_2 = \begin{bmatrix} 12 & 8 & 4 \\ 0 & 4 & 4 \\ 0 & 4 & 4 \end{bmatrix} \tag{1.3.23}$$



一个有向图称为**强连通的**, 如果任何两个不同结点 P_i 和 $P_j(i \neq j)$ 之间都可以沿有向线段直接或间接到达.

定义 1.3.2 称一个矩阵 $A = (a_{ij}) \in C^{n\times n}$ 有性质 SC, 假若对每一对不同的整数 $p, q(1 \leqslant p, q \leqslant n)$, 存在一个不同整数组成的序列 $k_1 = p, k_2, k_3, \cdots, k_{m-1}, k_m = q(1 \leqslant m \leqslant n)$, 使得矩阵元素 $a_{k_1,k_2}, a_{k_2,k_3}, \cdots, a_{k_{m-1},k_m}$ 均非零.

通过方向不难知道, 矩阵的 SC **性质**、有向图强连通及不可约性三者都是等价的. 因此可以通过判断有向图是否强连通来判断矩阵是否可约. 例如上面的矩阵 A_1、A_4 均可约, A_2、A_3 均不可约.

定理 1.3.7 (Better) 若 λ 是矩阵 $A = (a_{ij}) \in C^{n\times n}$ 的特征值且是 Geršchgorin 圆盘的边界点, 也即对所有 $i = 1, \cdots, n$ 均满足

$$|\lambda - a_{ii}| > R_i = \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$$

若 A 不可约或具有 SC 性质, 则

(1) 每个 Geršchgorin 圆盘都通过 λ, 且

(2) 若 $A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$, 且 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T \neq 0$, 则 $|x_i| = |x_j|$ (对所有 $i, j = 1, \cdots, n$).

证明 设 $\boldsymbol{x}$ 相应于 λ 的特征向量, 即 $A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$. 又设 $|x_i| \leqslant |x_p| = \|\boldsymbol{x}\|_\infty > 0$ (对所有 $i = 1, \cdots, n$), 则由引理 1.3.1 知

$$|\lambda - a_{pp}| = R_p = \sum_{j=1, j\neq p}^{n} |a_{pj}|$$

设 $q \neq p(1 \leqslant q \leqslant n)$. 因为 A 具有性质 SC(或不可约), 所以有互不相同的指标序列 $k_1 = p, k_2, k_3, \cdots, k_m = q$, 使矩阵元素 $a_{k_1,k_2}, \cdots, a_{k_{m-1},k_m}$ 都非负. 因为 $a_{k_1,k_2} = a_{p,k_2} \neq 0$, 由引理 1.3.1 结论 (2) 知, $|x_p| = |x_{k_2}|$, 同理由 $a_{k_2,k_3} \neq 0$ 知 $|x_{k_3}| = |x_{k_2}| = |x_p|$. 以此类推我们由 $|x_{k_i}| = |x_p|$ 对所有 $i = 1, \cdots, m$ 均成立. 由引理结论 (1) 知

$$|\lambda - a_{k_m,k_m}| = |\lambda - a_{qq}| = R_q = \sum_{j=1,j\neq q}^{n} |a_{qj}|$$

也即第 q 个 Geršchgorin 圆通过 λ, 且 $|x_q| = |x_p|$. 由于 q 任意, 所以每个 Geršchgorin 圆都通过 λ, 且 $|x_i| = |x_p|, i = 1, \cdots, n$.

□

定理 1.3.8 若 $A = (a_{ij}) \in C^{n\times n}$ 不可约对角占优, 则 A 非奇异.

证明 首先根据 Geršchgorin 圆盘定理, 我们易证（读者自证）下列事实: 对给定的 A 的一个特征值 λ, λ 不是任何一个 Geršchgorin 圆盘的内部点当且仅当对所有 $i = 1, \cdots, n$, 有

$$|\lambda - a_{ii}| \geqslant R_i = \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}| \tag{1.3.24}$$

然后用反证法证明该定理. 假设 A 不可逆 (奇异), 则 A 必有特征值 0, 因为 A 对角占优, 即

$$|a_{ii}| \geqslant R_i = \sum_{i=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \cdots, n \tag{1.3.25}$$

恒成立, 因此 $\lambda = 0$ 满足不等式 (1.3.24), 所以 0 不可能是任何 Geršchgorin 圆盘的内部点, 又 A 具有不可约性, 所以由 Better 定理 1.3.7 知, 每个 Geršchgorin 圆都必通过 0, 但因 (1.3.25) 式至少要对某一个 i 不等号严格成立, 不妨设 $|a_{ii}| > R_i$, 这说明第 i 个 Geršchgorin 圆不通过 0 点, 矛盾. 故 A 非奇异.

□

§1.3.3 Schur 定理

记矩阵 $A \in C^{n\times n}$ 的特征多项式为 $|A - \lambda I|$ 的 n 个根为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$. 这些根的集合称为谱, 记为 $\lambda(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}$.

引理 1.3.2 若矩阵 $T \in C^{n\times n}$ 可写成

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix} \tag{1.3.26}$$

其中 T_{11} 是 p 阶矩阵, T_{22} 是 q 阶矩阵, T_{12} 是 $p \times q$ 矩阵, 则 $\lambda(T) = \lambda(T_{11}) U \lambda(T_{22})$.

证明 设

$$Tx=\begin{bmatrix}T_{11} & T_{12}\\ 0 & T_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}$$

其中 $x_1\in C^p$, $x_2\in C^q$. 如果 $x_2\neq 0$, 则 $T_{22}x_2=\lambda_2 x_2$, 故 $\lambda\in\lambda(T_{22})$; 如果 $x_2=0$, 则 $T_{11}x_1=\lambda x_1$, 故 $\lambda\in\lambda(T_{11})$. 由此可知, $\lambda(T)\subset\lambda(T_{11})\cup\lambda(T_{22})$. 但集合 $\lambda(T)$ 和集合 $\lambda(T_{11})\cup\lambda(T_{22})$ 的基数相等, 因此 $\lambda(T)=\lambda(T_{11})\cup\lambda(T_{22})$.

□

引理 1.3.3 若矩阵 $A\in C^{n\times n}$, $B\in C^{p\times p}$, 且 $X\in C^{n\times p}$ 满足

$$AX=XB,\quad \mathrm{rank}(X)=p \tag{1.3.27}$$

则存在一个酉矩阵 $Q\in C^{n\times n}$, 使得

$$Q^HAQ=T=\begin{bmatrix}T_{11} & T_{12}\\ 0 & T_{22}\end{bmatrix} \tag{1.3.28}$$

其中 $\lambda(T_{11})=\lambda(A)\cap\lambda(B)$, T_{11} 是 p 阶方阵, T_{22} 是 $n-p$ 阶方阵, T_{12} 是 $p\times(n-p)$ 阶矩阵.

证明 设

$$X=Q\begin{bmatrix}R_1\\ 0\end{bmatrix},\quad Q\in C^{n\times n},\quad R_1\in C^{p\times p}$$

是 X 的一个 QR 分解, 代入 (1.3.27), 整理得

$$\begin{bmatrix}T_{11} & T_{12}\\ T_{21} & T_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}R_1\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}R_1\\ 0\end{bmatrix}B$$

这里

$$Q^HAQ=\begin{bmatrix}T_{11} & T_{12}\\ T_{21} & T_{22}\end{bmatrix}$$

其中 $T_{11}\in C^{p\times p}$, $T_{22}\in C^{q\times q}$, $T_{12}\in C^{p\times(n-p)}$, $T_{21}\in C^{(n-p)\times p}$. 利用 R_1 的非奇异性以及方程 $T_{21}R_1=0$ 和 $T_{11}R_1=R_1B$, 得 $T_{21}=0$ 和 $\lambda(T_{11})=\lambda(B)$. 由引理 1.3.2 有, $\lambda(A)=\lambda(T)=\lambda(T_{11})\cup\lambda(T_{22})$, 从而 $\lambda(T_{11})=\lambda(A)\cap\lambda(B)$ 成立.

□

定理 1.3.9 (Schur 定理) 若 $A\in C^{n\times n}$, 则存在一个酉阵 $Q\in C^{n\times n}$, 使得

$$Q^HAQ=T=D+N$$

其中 $D=\mathrm{diag}(\lambda_1,\cdots,\lambda_n)$, $N\in C^{n\times n}$ 是严格上三角阵.

证明 用数学归纳法证明. 当 $n=1$ 时, 定理显然成立. 假设定理当 $n-1$ 时成立, 如果 $Ax=\lambda x(x\neq 0)$, 则由引理 1.3.3(取 $B=\lambda$), 存在一个酉阵 U, 使得

$$U^H AU=\begin{bmatrix}\lambda & W^H\\ 0 & V\end{bmatrix}$$

其中 $W^H\in C^{1\times(n-1)}$, $V\in C^{(n-1)\times(n-1)}$. 由归纳假设, 存在一个酉阵 $\tilde{U}$ 使得 $\tilde{U}^H V\tilde{U}$ 是上三角阵, 这样, 如果 $Q=U\mathrm{diag}(1,\tilde{U})$, 那么 $Q^H AQ$ 是上三角阵.

□

Schur 定理也可说成任何一个 n 阶复矩阵 A 酉相似于一个上三角矩阵. 在稳定性的判断中, 我们会遇到正规矩阵. 作为 Schur 定理的应用, 考虑下面的定理.

定理 1.3.10 设 $A\in C^{n\times n}$, 则 A 是正规矩阵的充要条件是存在酉矩阵 U, 使得

$$U^H AU=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$$

其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 是 A 的特征值.

证明 *必要性* 根据 Schur 引理知, 存在 n 阶酉矩阵, 使得

$$U^H AU=B$$

其中 B 是上三角阵, 这表明 A 与 B 酉相似, 从而 B 也是正规矩阵, 再由 $BB^H=B^H B$ 可推知 B 一定是对角阵.

充分性 因为对角阵是正规矩阵, 而与正规矩阵酉相似的矩阵为正规矩阵, 故 A 是正规矩阵.

□

推论 1.3.2 n 阶正规矩阵 A 有 n 个线性无关的特征向量

证明 由定理 1.3.10 知, 有酉矩阵 U, 使得 $U^H AU$ 为对角阵 Λ, 即

$$U^H AU=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)=\Lambda$$

也即

$$AU=U\Lambda$$

这表明 Λ 的对角元素是 A 的特征值, 注意 U 矩阵的各列是单位向量且两两正交. U 的 n 个列正是特征向量的正交组.

□

§1.4 向量和矩阵的范数

定义 1.4.1 向量 $\boldsymbol{x}$ 的范数 (或模)$||\boldsymbol{x}||$ 是一个非负实数, 满足

(1) 正定性 $||\boldsymbol{x}|| > 0$, $\boldsymbol{x} \neq 0$.

(2) 齐次性 $||c\boldsymbol{x}|| = |c|\ ||\boldsymbol{x}||$, 这里 c 为任何复数.

(3) 三角不等式 $||\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}|| \leqslant ||\boldsymbol{x}|| + ||\boldsymbol{y}||$.

例 7 证明 $||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| \geqslant |\ ||\boldsymbol{x}|| - ||\boldsymbol{y}||\ |$.

证明 因为

$$||\boldsymbol{x}|| = ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + \boldsymbol{y}|| \leqslant ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| + ||\boldsymbol{y}||$$

所以

$$||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| \geqslant ||\boldsymbol{x}|| - ||\boldsymbol{y}||$$

同理

$$||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| = ||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}|| \geqslant ||\boldsymbol{y}|| - ||\boldsymbol{x}||$$

所以

$$||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| \geqslant |\ ||\boldsymbol{x}|| - ||\boldsymbol{y}||\ |$$

□

对一个向量可赋予三种如下简单的 $p-$ 范数

$$||\boldsymbol{x}||_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}, \quad p = 1, 2, \infty$$

其中 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$. 可以验证上式满足向量范数的定义. 这三种范数分别称为 1− 范数、2− 范数 (Euclid 范数) 和 ∞− 范数.

定理 1.4.1

$$||\boldsymbol{x}||_\infty = \max_i |x_i|.$$

证明

$$||\boldsymbol{x}||_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} = \max_i |x_i| \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{|x_i|^p}{(\max_i |x_i|)^p}\right)^{\frac{1}{p}}$$

由于

$$1 \leqslant \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{|x_i|^p}{(\max_i |x_i|)^p}\right)^{\frac{1}{p}} \leqslant n^{\frac{1}{p}}$$

故

$$||\boldsymbol{x}||_\infty = \lim_{p\to\infty} ||\boldsymbol{x}||_p = \max_i |x_i|$$

□

类似地, 可定义矩阵范数.

定义 1.4.2 矩阵的范数是一个非负实数, 满足

(1) 正定性 $||A|| > 0$, 若 $A \neq 0$.

(2) 齐次性 $||cA|| = |c|\ ||A||$, c 为任何复数.

(3) 三角不等式 $||A + B|| \leqslant ||A|| + ||B||$.

(4) 相容性 $||AB|| \leqslant ||A||\ ||B||$.

向量的范数推广到矩阵的范数时, 增加了相容性条件. 向量的 1– 范数推广到矩阵的范数为 $||A|| = \sum\limits_{i=1}^{n}\sum\limits_{j=1}^{n}|a_{ij}|$, 可以验证满足上面定义的条件, 但向量的 ∞– 范数不能推广到矩阵范数, 例如取

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

则

$$AB = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad ||A|| = 1, \quad ||B|| = 1, \quad ||AB|| = 2$$

不满足矩阵乘法的相容性条件.

复数域上的 n 阶矩阵 $A = (a_{ij})$ 的一个常见范数是**Frobenius 范数** (也称**Euclid 范数**)

$$||A||_F = (\sum_{i,j=1}^{n}|a_{ij}|^2)^{\frac{1}{2}}$$

显然该范数是向量范数的推广. 矩阵范数还可以利用向量的范数来定义, 这要用到向量范数与矩阵范数的相容性. 如果 $||A||$ 与 $||\boldsymbol{x}||$ 满足

$$||A\boldsymbol{x}|| \leqslant ||A||\ ||\boldsymbol{x}||, \quad \boldsymbol{x} \neq 0 \tag{1.4.1}$$

则称矩阵范数 $||A||$ 与向量范数 $||\boldsymbol{x}||$**相容**. 该式用来建立矩阵的诱导范数. 由向量 p–范数 $||\boldsymbol{x}||_p$ 所诱导的矩阵范数称为**矩阵诱导**p **范数**为

$$||A||_p = \sup_{||\boldsymbol{x}||_p \neq 0}\frac{||A\boldsymbol{x}||_p}{||\boldsymbol{x}||_p} = \sup_{||\boldsymbol{x}||_p = 1}||A\boldsymbol{x}||_p, \quad 1 \leqslant p \leqslant \infty \tag{1.4.2}$$

该式表示当 $\boldsymbol{x}$ 在模 $||\cdot||_p$ 为 1 的向量集上变化时, 矩阵 A 的模是向量 $A\boldsymbol{x}$ 模的上确界. 当 $p = 1, 2, \infty$, 即有

列和范数

$$||A||_1 = \sup_{||\boldsymbol{x}||_1 = 1}||A\boldsymbol{x}||_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}| \tag{1.4.3}$$

谱范数

$$||A||_2 = \sup_{||\boldsymbol{x}||_2 = 1}||A\boldsymbol{x}||_2 = \sqrt{\rho(A^H A)} = \sqrt{\lambda_{\max}(A^H A)} \tag{1.4.4}$$

其中 $\lambda_{\max}(A^H A)$ 表示矩阵 $A^H A$ 特征值之最大值, 即 $||A||_2$ 是 A 的最大正特征值.

行和范数

$$||A||_\infty = \sup_{||x||_\infty=1} ||Ax||_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}| \tag{1.4.5}$$

由列和范数及行和范数的表达式知

$$||A||_1 = ||A^T||_\infty$$

§1.4.1 矩阵范数与谱半径的关系

定理 1.4.2 对任何矩阵 $A \in C^{n\times n}$, $||A|| \geqslant \rho(A)$, 其中 $||A||$ 是 A 的任何一种范数.

证明 对 A 的任何特征值 λ 及相应的非零特征向量 x, 满足

$$|\lambda| \cdot ||x|| = ||Ax|| \leqslant ||A|| \cdot ||x||$$

所以对 A 的任何特征值 λ

$$|\lambda| \leqslant ||A||$$

因此

$$\rho(A) \leqslant ||A||$$

□

例 8 证明若 A 是正规矩阵, 则 $\rho(A) = ||A||_2$.

证明

$$||A||_2^2 = \max_{x\neq 0} \frac{||Ax||_2^2}{||x||_2^2} = \max_{x\neq 0} \frac{x^H A^H x}{x^H x} = \rho(A^H A) = \rho^2(A)$$

即

$$\rho(A) = ||A||_2$$

□

定理 1.4.3 对任何实矩阵 A, $||A||_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$.

证明 $A^T A$ 是对称和非负定的. 设 $x^{(i)}(i = 1, 2, \cdots, n)$ 是 $A^T A$ 的实特征向量的一个正交系, 即

$$A^T A x^{(i)} = \lambda_i x^{(i)}, \quad 0 \leqslant \lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n$$

其中

$$x^{(i)^T} x^{(j)} = 0, \quad i \neq j$$

和

$$\boldsymbol{x}^{(i)^T}\boldsymbol{x}^{(i)}=1, \quad 1\leqslant i\leqslant n$$

在由 $\boldsymbol{x}^{(i)}(i=1,2,\cdots,n)$ 所张成的空间中, 任何其他非零向量 $\boldsymbol{x}$ 可以表示为

$$\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{x}^{(i)}$$

所以

$$\left(\frac{||A\boldsymbol{x}||_2}{||\boldsymbol{x}||_2}\right)^2=\frac{(A\boldsymbol{x},A\boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}=\frac{\boldsymbol{x}^TA^TA\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}$$

$$=\frac{(\sum_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{x}^{(i)})^T(\sum_{i=1}^{n}\lambda_ic_i\boldsymbol{x}^{(i)})}{(\sum_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{x}^{(i)})^T(\sum_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{x}^{(i)})}$$

$$=\frac{\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|c_i|^2}{\sum_{i=1}^{n}|c_i|^2}$$

由该式得到

$$0\leqslant\lambda_1\leqslant\left(\frac{||A\boldsymbol{x}||_2}{||\boldsymbol{x}||_2}\right)^2\leqslant\lambda_n$$

但 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(n)}$ 表示右边的等号是可能的, 因此

$$||A||_2^2=\max_{||\boldsymbol{x}||_2\neq0}\frac{||A\boldsymbol{x}||_2}{||\boldsymbol{x}||_2}=\lambda_n=\rho(A^TA)$$

□

定理 1.4.4 若 A 是对称的, 则 $||A||_2=\rho(A)$.

证明 $||A||_2^2=\rho(A^TA)=\rho(A^2)=\rho^2(A)$, 即 $||A||_2=\rho(A)$.

□

§1.4.2 矩阵范数的估计

定理 1.4.5 对任何矩阵 $A\in C^{n\times n}$ 和 $\varepsilon>0$, 至少有一种从属矩阵范数, 使得

$$||A||\leqslant\rho(A)+\varepsilon$$

证明 对任一矩阵 A, 由 Schur 定理 1.3.9 知, 存在一个可逆矩阵 U, 使得 $U^{-1}AU$ 是上三角矩阵, 即

$$U^{-1}AU=\begin{bmatrix}\lambda_1 & t_{12} & t_{13} & \cdots & t_{1n}\\ & \lambda_2 & t_{23} & \cdots & t_{2n}\\ & & \ddots & & \vdots\\ & & & \lambda_{n-1} & t_{n-1,n}\\ & & & & \lambda_n\end{bmatrix}$$

其中 λ_i 是矩阵 A 的特征值, 对任何数 $\delta\neq 0$, 作矩阵

$$D_\delta=\mathrm{diag}(1,\delta,\delta^2,\cdots,\delta^{n-1})$$

于是

$$(UD_\delta)^{-1}A(UD_\delta)=\begin{bmatrix}\lambda_1 & \delta t_{12} & \delta^2 t_{13} & \cdots & \delta^{n-1}t_{1n}\\ & \lambda_2 & \delta t_{23} & \cdots & \delta^{n-2}t_{2n}\\ & & \ddots & & \vdots\\ & & & \lambda_{n-1} & \delta t_{n-1,n}\\ & & & & \lambda_n\end{bmatrix}$$

对给定的 $\varepsilon>0$, 取定 $\delta>0$, 使得

$$\sum_{j=i+1}^{n}|\delta^{j-i}t_{ij}|\leqslant\varepsilon,\quad 1\leqslant i\leqslant n-1$$

于是, 依赖于矩阵 A 和数 ε 的算子

$$\|\cdot\|:\ B_{n\times n}\to\|B\|=\|(UD_\delta)^{-1}B(UD_\delta)\|_\infty$$

这就是要找的范数. 因为一方面, 由于 δ 的选择以及矩阵范数 $\|\cdot\|_\infty$ 的定义 ($\|(c_{ij})\|_\infty=\max\limits_i\sum\limits_j|c_{ij}|$), 故 $\|A\|\leqslant\rho(A)+\varepsilon$. 另一方面, 这样定义的算子确实是矩阵的范数, 可以验证该范数是从属于向量范数

$$v\in C^n\to\|(UD_\delta)^{-1}v\|_\infty$$

的矩阵范数.

□

推论 1.4.1 设 A 是 n 阶矩阵, $\rho(A)<1$, 则存在矩阵范数 $\|\cdot\|_s$ 使得 $\|A\|_s<1$.

证明 设 $\rho(A)=L_0<L<1$, 取 $\varepsilon=1-L>0$, 由定理 1.4.5 知, 存在矩阵 A 的从属范数 $\|\cdot\|_s$, 满足

$$\|A\|_s\leqslant\rho(A)+\varepsilon<L+1-L=1$$

故结论成立.

□

引理 1.4.1 若 n 阶实矩阵 A 半正定, 则对任何参数 $\sigma \geqslant 0$, 有估计式

$$\|(I+\sigma A)^{-1}\| \leqslant 1 \tag{1.4.6}$$

其中 I 为单位矩阵.

证明

$$\|(I+\sigma A)^{-1}\|^2 = \max_{x \neq 0} \frac{((I+\sigma A)^{-1}\boldsymbol{x}, (I+\sigma A)^{-1}\boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})} \tag{1.4.7}$$

令

$$\boldsymbol{y} = (I+\sigma A)^{-1}\boldsymbol{x} \tag{1.4.8}$$

则

$$\begin{aligned}\|(I+\sigma A)^{-1}\| &= \max_{y \neq 0} \frac{(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})}{((I+\sigma A)\boldsymbol{y}, (I+\sigma A)\boldsymbol{y}))} \\ &= \frac{1}{\min\limits_{y \neq 0}\left[1 + 2\sigma\dfrac{(A\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})}{(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})} + \sigma^2\dfrac{(A\boldsymbol{y}, A\boldsymbol{y})}{(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})}\right]}\end{aligned} \tag{1.4.9}$$

因为 A 半正定, $\sigma \geqslant 0$, 故上式右端的分母不小于 1, 引理得证.

□

注: 若 A 正定, $\sigma > 0$, 则 $\|(I+\sigma A)^{-1}\| < 1$.

引理 1.4.2 (Kellogg 引理) 若 n 阶实矩阵 A 半正定, 则对任何参数 $\sigma \geqslant 0$, 有估计式

$$\|(I-\sigma A)(I+\sigma A)^{-1}\| \leqslant 1 \tag{1.4.10}$$

证明 注意到变换 (1.4.8) 式, 有

$$\begin{aligned}\|(I-\sigma A)(I+\sigma A)^{-1}\|^2 &= \max_{x \neq 0} \frac{((I-\sigma A)(I+\sigma A)^{-1}\boldsymbol{x}, (I-\sigma A)(I+\sigma A)^{-1}\boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})} \\ &= \max_{y \neq 0} \frac{((I-\sigma A)\boldsymbol{y}, (I-\sigma A)\boldsymbol{y})}{((I+\sigma A)\boldsymbol{y}, (I+\sigma A)\boldsymbol{y})} \\ &= \max_{y \neq 0} \frac{(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}) - 2\sigma(A\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}) + \sigma^2(A\boldsymbol{y}, A\boldsymbol{y})}{(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}) + 2\sigma(A\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}) + \sigma^2(A\boldsymbol{y}, A\boldsymbol{y})} \leqslant 1\end{aligned} \tag{1.4.11}$$

□

注 1: 若 A 正定, $\sigma > 0$, 则有

$$\|(I-\sigma A)(I+\sigma A)^{-1}\| < 1 \tag{1.4.12}$$

注 2: 若 A 半正定, $\sigma \geqslant 0$, 则有

$$\|(I+\sigma A)^{-1}(I-\sigma A)\| \leqslant 1 \tag{1.4.13}$$

这可由 $(I+\sigma A)^{-1}$ 和 $(I-\sigma A)$ 的可交换性得出. 由恒等式

$$(I-\sigma A)^{-1}(I-\sigma A) = (I+\sigma A)(I+\sigma A)^{-1} \tag{1.4.14}$$

两端左乘 $(I-\sigma A)^{-1}(I-\sigma A)$, 并注意到 $(I+\sigma A)$ 与 $(I-\sigma A)$ 可交换, 得

$$(I+\sigma A)^{-1}(I-\sigma A) = (I-\sigma A)(I+\sigma A)^{-1} \tag{1.4.15}$$

再对该式应用引理 1.4.2 即有结论 (1.4.13) 式.

定理 1.4.6 设 $A \in C^{n\times n}$ 满足 $\|A\| < 1$, 则 $I \pm A$ 为非奇异矩阵, 且

$$\frac{1}{1+\|A\|} \leqslant \|(I-A)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{1-\|A\|} \tag{1.4.16}$$

证明 若 $I-A$ 奇异, 则 $\det(I-A)=0$. 于是存在 $\boldsymbol{x} \neq 0$, 满足 $(I-A)\boldsymbol{x}=0$, 也即 $\boldsymbol{x}=A\boldsymbol{x}$, 所以

$$\|\boldsymbol{x}\| = \|A\boldsymbol{x}\| \leqslant \|A\|\,\|\boldsymbol{x}\|, \quad \|\boldsymbol{x}\| \neq 0$$

即 $\|A\| \geqslant 1$ 与假设矛盾, 因此 $I-A$ 非奇异.

由等式 $(I-A)^{-1}(I-A)=I$ 得

$$(I-A)^{-1} = (I-A)^{-1}A + I \tag{1.4.17}$$

所以

$$\|(I-A)^{-1}\| \leqslant 1 + \|(I-A)^{-1}\|\,\|A\|$$

即

$$\|(I-A)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{1-\|A\|} \tag{1.4.18}$$

由 (1.4.17) 式得

$$I = (I-A)^{-1} - (I-A)^{-1}A$$

所以

$$1 \leqslant \|(I-A)^{-1}\|(1+\|A\|)$$

即

$$\|(I-A)^{-1}\| \geqslant \frac{1}{1+\|A\|} \tag{1.4.19}$$

由 (1.4.18) 式和 (1.4.19) 式知不等式 (1.4.16) 成立. 显然, 将 (1.4.16) 式中的 A 替换成 $-A$ 时, (1.4.16) 式仍成立.

□

§1.4.3 矩阵序列的收敛性

给定矩阵序列 $\{A^{(k)}\} \in C^{m\times n}$, 其中 $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})_{m\times n}$. 当 mn 个数列 $\{a_{ij}^{(k)}\}$ 都有极限时, 即

$$\lim_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}, \quad i = 1, \cdots, m;\ j = 1, \cdots, n$$

则称矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 收敛于 $A = (a_{ij})_{m\times n}$. 记为 $\lim\limits_{k\to\infty} A^{(k)} = A$, 或 $A^{(k)} \to A$ $(k \to \infty)$.

矩阵序列的一种特殊情况是由方阵 $A \in C^{n\times n}$ 的幂构成的矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$.

定理 1.4.7 若 $||A|| < 1$, 则 $\lim\limits_{r\to\infty} A^r = 0$.

证明

$$||A^r|| = ||AA^{r-1}|| \leqslant ||A||\ ||A^{r-1}|| \leqslant ||A||^2\ ||A||^{r-2} \leqslant \cdots \leqslant ||A||^r$$

因 $||A|| < 1$, 两端取极限 $(r \to \infty)$ 即得

$$\lim_{r\to\infty} ||A^r|| = 0$$

□

定理 1.4.8 若 $A \in C^{n\times n}$, 则 $\lim\limits_{r\to\infty} A^r = 0$ 当且仅当 $\rho(A) < 1$.

证明一 必要性 已知 $\lim\limits_{r\to\infty} A^r = 0$. 设 $\rho(A) = |\lambda|$. 由于对任意 r 有 $\lambda^r \in \lambda(A^r)$, 由定理 (1.4.2) 知

$$\rho(A)^r = |\lambda|^r \leqslant \rho(A^r) \leqslant ||A^r|| \to 0 \quad (r \to \infty)$$

从而

$$\lim_{r\to\infty} \rho(A)^r = 0$$

因此 $\rho(A) < 1$.

充分性 设已知 $\rho(A) < 1$. 由定理 1.4.5 知, 必有算子范数 $||\cdot||$ 使得 $||A|| < 1$, 从而

$$0 \leqslant ||A^r|| \leqslant ||A||^r \to 0 \quad (r \to \infty)$$

因此 $\lim\limits_{r\to\infty} A^r = 0$.

证明二 对给定的矩阵 A, 存在 $n \times n$ 非奇异阵 S, 将 A 化为 Jordan 标准形

$$SAS^{-1} = \begin{bmatrix} J_1 & & & \\ & J_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & J_r \end{bmatrix} \triangleq \tilde{A}$$

其中 A 的 Jordan 子矩阵是

$$J_l = \begin{bmatrix} \lambda_l & 1 & & & \\ & \lambda_l & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_l & 1 \end{bmatrix}_{n_l \times n_l}, \quad 1 \leqslant l \leqslant n$$

于是

$$J_l^2 = \begin{bmatrix} \lambda_l^2 & 2\lambda_l & & \cdots & 1 \\ & \lambda_l^2 & 2\lambda_l & \cdots & 1 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \lambda_l^2 & 2\lambda_l \\ & & & & \lambda_l^2 \end{bmatrix}, \quad n_l \geqslant 3$$

一般地

$$J_l^m = [d_{i,j}^{(m)}(l)], \quad 1 \leqslant i, j \leqslant n_l \tag{1.4.20}$$

其中

$$d_{i,j}^{(m)}(l) = \begin{cases} 0 & j < i \\ C_m^{j-i} \lambda_l^{m-j+i} & i \leqslant j \leqslant \min(n_l, m+i) \\ 0 & m+i < j \leqslant n_l \end{cases}$$

式中 C_m^{j-1} 表示二项式系数. 由

$$\tilde{A}_m = \begin{bmatrix} J_1^m & & & \\ & J_2^m & & \\ & & \ddots & \\ & & & J_r^m \end{bmatrix} = SA^mS^{-1}, \quad m \geqslant 1$$

若 A 收敛, 则 $\lim\limits_{m\to\infty} A^m = 0$, 从而 $\lim\limits_{m\to\infty} \tilde{A}^m = 0$. 因此必有 $\lim\limits_{m\to\infty} J_l^m = 0$. 由于 J_l 为上三角阵, 所以 J_l 的对角元素 λ_l 必须满足 $|\lambda_l| < 1 (1 \leqslant l \leqslant r)$, 显然, $\rho(A) < 1$ 成立.

另一方面, 若 $\rho(A) = \rho(\tilde{A}) < 1$, 则 $|\lambda_l| < 1 (1 \leqslant l \leqslant r)$, 由 (1.4.20) 式和定理 1.4.8 知, $\lim\limits_{m\to\infty} d_{ij}^{(m)}(l) = 0$, $\lim\limits_{m\to\infty} J_l^m = 0$, 因此, $\lim\limits_{m\to\infty} \tilde{A}^m = 0$, $\lim\limits_{m\to\infty} A^m = \lim\limits_{m\to\infty} S\tilde{A}^m S = 0$.

□

例 9 若

$$A = \begin{bmatrix} 0.8 & 0 \\ 0.5 & 0.7 \end{bmatrix}$$

证明 $\|A\|_1 > 1$ 和 $\|A\|_\infty > 1$, 但矩阵 A 是收敛的.

证明 这里 $\|A\|_1 = 1.3, \|A\|_\infty = 1.2$, 因为 A 的特征值为 0.7 和 0.8, 所以当 $r \to \infty$ 时, $A^r \to 0$.

□

§1.5 其他重要定理

§1.5.1 实系数多项式的根

下面是实系数多项式的根的绝对值不超过 1 的两个定理.

定理 1.5.1 实系数二次方程 $x^2-bx-c=0$ 的两根按模不大于 1 且其中至少有一根按模严格小于 1 的充要条件是

$$|b| \leqslant 1-c, \quad |c|<1 \tag{1.5.1}$$

证明 设 λ_1,λ_2 是方程的两个根, 由根与系数的关系, 有

$$\lambda_1+\lambda_2=b, \quad \lambda_1\lambda_2=-c \tag{1.5.2}$$

从而

$$\begin{aligned} |b| \leqslant 1-c &\Leftrightarrow |\lambda_1+\lambda_2| \leqslant 1+\lambda_1\lambda_2 \Leftrightarrow \lambda_1^2+\lambda_2^2 \leqslant 1+\lambda_1^2\lambda_2^2 \\ &\Leftrightarrow (1-\lambda_1^2)(1-\lambda_2^2) \geqslant 0 \end{aligned} \tag{1.5.3}$$

又

$$|c|=|\lambda_1|\cdot|\lambda_2| \tag{1.5.4}$$

若 $|\lambda_1|<1, |\lambda_2|<1$ 或 $|\lambda_1| \leqslant 1, |\lambda_2| \leqslant 1$, 则由 (1.5.3) 式和 (1.5.4) 式知 1.5.1 成立, 此即必要性.

若条件 (1.5.1) 成立, 则由 (1.5.3) 和 (1.5.4) 知, 应有

$$\begin{cases} (1-\lambda_1^2)(1-\lambda_2^2) \geqslant 0 \\ |\lambda_1|\cdot|\lambda_2|<1 \end{cases}$$

也即

$$\begin{cases} |\lambda_1| \leqslant 1,\ |\lambda_2| \leqslant 1 \quad \text{或} \quad |\lambda_1| \geqslant 1, |\lambda_2| \geqslant 1 \\ |\lambda_1|\cdot|\lambda_2|<1 \end{cases}$$

从而

$$|\lambda_1| \leqslant 1,\ |\lambda_2|<1 \quad \text{或} \quad |\lambda_1|<1,\ |\lambda_2| \leqslant 1$$

即充分性满足.

□

类似地读者可证如下定理.

定理 1.5.2 实系数二次方程 $x^2-bx-c=0$ 的两根按模不大于 1 的充要条件是

$$|b| \leqslant 1-c, \quad |c| \leqslant 1 \tag{1.5.5}$$

注意条件 (1.5.1) 可写成 $|b| \leqslant 1-c<2$ 的形式, 条件 (1.5.5) 可写成 $|b| \leqslant 1-c \leqslant 2$ 的形式.

§1.5.2 Newton-Cotes 型数值积分公式

设 $f(x)$ 为有限区间 $[a,b]$ 上的可积函数, 要近似计算定积分 $\int_a^b f(x)dx$. 通常我们用容易积分且又逼近被积函数的 $\varphi(x)$ 代替 $f(x)$ 来构造积分公式. 常取 $\varphi(x)$ 为一个多项式, 例如 $\varphi(x)$ 为关于基点

$$a \leqslant x_1 < x_2 < \cdots < x_{n+1} = b$$

的 Lagrange 插值多项式

$$P_n(x) = \sum_{i=1}^{n+1} l_i(x) f(x_i)$$

其中 $l_i(x)$ 为 Lagrange 基本多项式

$$\begin{aligned} l_i(x) &= \frac{w_{n+1}(x)}{(x-x_i)w'_{n+1}(x_i)}, \quad i=1,\cdots,n+1 \\ w_{n+1} &= (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{n+1}) \end{aligned} \tag{1.5.6}$$

于是

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n+1} A_i f(x_i) + E_n(f) \tag{1.5.7}$$

其中

$$A_i = \int_a^b l_i(x)dx, \quad i=1,\cdots,n+1 \tag{1.5.8}$$

此时

$$I_n(f) = \sum_{i=1}^{n+1} A_i f(x_i) \tag{1.5.9}$$

称为**插值求积公式**. 假设 $f(x)$ 具有 $n+1$ 阶连续导数, 则离散误差为

$$E_n(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)dx \tag{1.5.10}$$

若结点为等距结点 $h = x_{i+1} - x_i = \dfrac{b-a}{n}$, (1.5.9) 式称为 n 阶 Newton-Cotes 型求积公式, A_i 称为 Cotes 系数. 令 $x = a + th$, 则可算得 A_i 为

$$A_i = (-1)^{n+1-i} \frac{h}{(i-1)!(n+1-i)!} \int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt, \quad i=1,\cdots,n+1 \tag{1.5.11}$$

离散误差为

$$E_n(f) = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!} \int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt, \quad \eta \in (a,b) \tag{1.5.12}$$

当 $n=1$ 时, 有两个结点 $x_1=a, x_2=b$, 由 (1.5.11) 式可算得

$$A_1=(-1)(b-a)\int_0^1(t-1)dt=\frac{b-a}{2},\quad A_2=(b-a)\int_0^1 tdt=\frac{b-a}{2} \tag{1.5.13}$$

因此

$$I_1(f)=\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) \tag{1.5.14}$$

此即**梯型公式**, 梯形公式的离散误差为

$$E_1(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi),\quad \xi\in(a,b) \tag{1.5.15}$$

§1.5.3 Green 公式

在将边值问题化成相应的变分形式时, 常要用到 Green 公式.

定理 1.5.3 设 Ω 是平面中具有分片光滑边界 $\partial\Omega$ 的有界开区域, $u,v\in C^2(\Omega)\cap C^1(\bar{\Omega})$, 则

(1)

$$\int\int_\Omega u\Delta v dxdy=\int_{\partial\Omega}u\frac{\partial v}{\partial n}ds-\int\int_\Omega \nabla u\cdot\nabla v dxdy \tag{1.5.16}$$

(2)

$$\int\int_\Omega (u\Delta v-v\Delta u)dxdy=\int_{\partial\Omega}(u\frac{\partial v}{\partial n}-v\frac{\partial u}{\partial n})ds \tag{1.5.17}$$

其中 $\frac{\partial u}{\partial n}$ 表示函数 u 在 $\partial\Omega$ 上沿外法向 $\boldsymbol{n}$ 的导数, Δ 为 Laplace 算子, ∇ 为梯度算子.

证明 根据微积分中的 Green 公式

$$\int\int_\Omega(\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{\partial Q}{\partial y})dxdy=\int_{\partial\Omega}Pdy-Qdx$$

其中 $P(x,y), Q(x,y)$ 在 Ω 上有连续的一阶偏导数. 将上式变形为

$$\int\int_\Omega(\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{\partial Q}{\partial y})dxdy=\int_{\partial\Omega}[P\cos(x,\boldsymbol{n})+Q\sin(x,\boldsymbol{n})]ds \tag{1.5.18}$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 为外法线方向. 在上式中令 $P=u\frac{\partial v}{\partial x}$, $Q=u\frac{\partial v}{\partial y}$, 得

$$\int\int_\Omega u\Delta v dxdy+\int\int_\Omega\nabla u\cdot\nabla v dxdy=\int_{\partial\Omega}[u\frac{\partial v}{\partial x}\cos(x,\boldsymbol{n})+u\frac{\partial v}{\partial y}\cos(x,\boldsymbol{n})]ds \tag{1.5.19}$$

也即

$$\int\int_\Omega u\Delta v dxdy=\int_{\partial\Omega}u\frac{\partial v}{\partial n}ds-\int\int_\Omega\nabla u\cdot\nabla v dxdy \tag{1.5.20}$$

此即 (1.5.16) 式.

交换 u,v 的地位, 由 (1.5.20) 式得

$$\iint_\Omega v\Delta u dxdy = \int_{\partial\Omega} v\frac{\partial u}{\partial n}ds - \iint_\Omega \nabla u\cdot\nabla v dxdy \tag{1.5.21}$$

将 (1.5.20) 式减取 (1.5.21) 式, 得

$$\iint_\Omega (u\Delta v - v\Delta u)dxdy = \int_{\partial\Omega}(u\frac{\partial v}{\partial n} - v\frac{\partial u}{\partial n})ds \tag{1.5.22}$$

此即 (1.5.17) 式.

□

Green 公式 (1.5.16) 式和 (1.5.17) 式有如下变形. 若 $a(x,y)\in C^1(\Omega)$, 则还成立

$$\iint_\Omega \left[\frac{\partial}{\partial x}(a\frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(a\frac{\partial u}{\partial y})\right] v dxdy = \int_{\partial\Omega} a\frac{\partial u}{\partial n}v ds - \iint_\Omega a\nabla u\cdot\nabla v dxdy \tag{1.5.23}$$

$$\iint_\Omega [u\nabla\cdot(a\nabla v) - v\nabla\cdot(au)]dxdy = \int_{\partial\Omega} a(v\frac{\partial u}{\partial n} - u\frac{\partial v}{\partial n})ds \tag{1.5.24}$$

对 (1.5.23) 式, 只要在 (1.5.18) 式中令 $p = av\frac{\partial u}{\partial x}, Q = av\frac{\partial u}{\partial y}$, 再化简即可的 (1.5.23) 式. 再类似定理的证明, 由 (1.5.23) 式即可得 (1.5.24) 式.

通常称公式 (1.5.16) 为**第一 Green 公式**, 称公式 (1.5.17) 为**第二 Green 公式**. 实际上, 这两个公式对 $\mathbf{R}^n$ 维中具有分片光滑边界 $\partial\Omega$ 的有界开区域均成立.

练 习

1. 求矩阵

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

的特征值并证明它们相互正交.

2. 对 $A\in R^{m\times n}$, 证明关系式 (1) $||A||_2 \leqslant ||A||_F \leqslant \sqrt{n}||A||_2$. (2) $\frac{1}{\sqrt{n}}||A||_\infty \leqslant ||A||_2 \leqslant \sqrt{m}||A||_\infty$. (3) $\frac{1}{\sqrt{n}}||A||_1 \leqslant ||A||_2 \leqslant \sqrt{n}||A||_1$.

3. 若

$$A = \begin{bmatrix} \alpha & 4 \\ 0 & \alpha \end{bmatrix}$$

其中 α 是一个任意实数, 证明

$$||A^m||_2 = \alpha^m\left[1 + 8\frac{m^2}{\alpha^2}\left(1 + (1 + \frac{\alpha^2}{4m^2})^{\frac{1}{2}}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

4. 设 $||x||_\alpha$ 是向量范数, 则

$$||A||_\beta = \max_{x\neq 0} \frac{||Ax||_\alpha}{||x||_\alpha}$$

满足矩阵范数定义, 且 $||A||_\beta$ 是与向量范数 $||x||_\alpha$ 相容的范数.

5. 证明 $\rho(A^2) \equiv \rho^2(A)$.

6. 求矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

的谱半径和谱模, 其中 α 是实数, 且证明当 $\alpha = 0$ 时谱半径和谱模相等.

7. 若

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

证明 $||A||_2 = \rho(A)$, 但若

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

则 $||A||_2 > \rho(A)$.

8. 证明 $||A||_2^2 \leqslant ||A||_\infty ||A||_1$.

9. 证明当 $r \to \infty$ 时,

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \to 0$$

10. 若 A 是 $n \times n$ 非奇异复矩阵, 证明 A 的特征值 λ 满足

$$\frac{1}{||A^{-1}||} \leqslant |\lambda| \leqslant ||A||$$

11. 若 A 是 $n \times n$ 复矩阵, 则 $\lim\limits_{r\to\infty} A^r = I$ 当且仅当 $A = I$.

12. 设 $\lim\limits_{k\to\infty} A^{(k)} = A$. 证明 $\lim\limits_{k\to\infty} ||A^{(k)}|| = ||A||$, 其中 $A^{(k)}$ 与 A 均为 $m \times n$ 阶复矩阵, $||\cdot||$ 是矩阵的任一种范数.

13. 设 $A = (a_{ij}) \in C^{n\times n}$ 不可约对角占优, 则 A 非奇异.

第二章　有限差分近似基础

本章介绍有限差分近似的基础知识. 有限差分法是一种离散方法, 离散过程本身是用一个插值多项式及其微分来代替偏微分方程的解. 首先要把所给方程的求解区域网格剖分, 然后再对方程中的导数进行充分近似, 得到关于网格点上未知函数的线性代数方程组. 我们以 Taylor 级数展开为基础, 介绍空间导数的近似方法, 并给出近似导数精确到任意阶精度的一般方法. 在此基础上, 介绍了有限体积法建立差分方程的过程. 最后, 对有限差分格式的误差作了 Fourier 分析.

§2.1　网格及有限差分记号

最简单的网格涉及时间和空间, 例如考虑下列初边值问题的求解

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0,1), t > 0 \tag{2.1.1}$$

$$u(x,0) = f(x), \quad x \in [0,1] \tag{2.1.2}$$

$$u(0,t) = a(t), \quad u(1,t) = b(t), \quad t \geqslant 0 \tag{2.1.3}$$

其中 $f(0) = a(0), f(1) = b(0)$. ν 为常数.

如图 2.1, 首先对求解区域用网格剖分. 用时间间隔为 Δt, 空间间隔为 Δx 的两组平行于坐标轴的直线把求解区域网格化, 两组直线的交点称为网格点或结点.

我们用 $u_j^n (j = 0, \cdots, M)$ 表示 u 在点 $(j\Delta x, n\Delta t)$ 或 (j, n) 的近似值. 下一步对问题 (2.1.1)~(2.1.3) 进行近似. 注意

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{u(x, t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t}$$

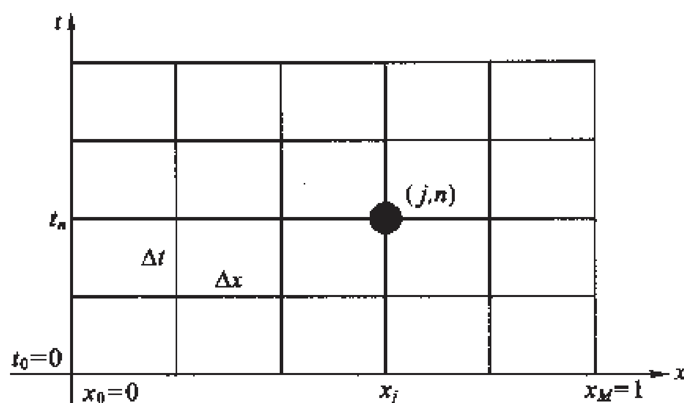


图 2.1 网格剖分示意图

所以 $\partial u(j\Delta x, n\Delta t)/\partial t$ 的一个合理近似是

$$\frac{\partial u(j\Delta x, n\Delta t)}{\partial t} \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

类似地, 我们在结点 $(j\Delta x, n\Delta t)$ 处近似 $\partial^2 u/\partial x^2$, 即

$$\frac{\partial u^2(j\Delta x, n\Delta t)}{\partial^2 x} \approx \frac{(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}^n - (\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x}$$

$$\approx \frac{\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} - \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}}{\Delta x} \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

因此偏微分方程 (2.1.1) 在点 $(j\Delta x, n\Delta t)$ 处可近似为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \tag{2.1.4}$$

即

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \tag{2.1.5}$$

初边值条件 (2.1.2) 和 (2.1.3) 可近似为

$$u_j^0 = f(j\Delta x), \quad j = 0, \cdots, M \tag{2.1.6}$$

$$u_0^{n+1} = a((n+1)\Delta t), \quad n = 0, 1, \cdots \tag{2.1.7}$$

$$u_M^{n+1} = b((n+1)\Delta t), \quad n = 0, 1, \cdots \tag{2.1.8}$$

现在我们得到了数值求解边值问题 (2.1.1)~(2.1.3) 的一个数值求解格式. 该格式是一个显式格式, 因为在 $(n+1)$ 时间层的量可以显式地求解.

§2.2 空间导数近似

导数的差分近似可以通过 Taylor 级数展开来计算. 例如考虑 $u(x,t)$, 其中 t 固定. 本小节为简单起见, 将 $u(x,t)$ 中的 t 省写, 意指考虑的量在 t 处计算. 根据上面的记号, 记 $x=j\Delta x$, $u(x+k\Delta x)=u(j\Delta x+k\Delta x)=u_{j+k}$. 假定 $u(x,t)$ 可微, 对 x 作 Taylor 展开

$$u_{j+k}=u_j+(k\Delta x)(\frac{\partial u}{\partial x})_j+\frac{1}{2}(k\Delta x)^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j+\cdots+\frac{1}{n!}(k\Delta x)^n(\frac{\partial^n u}{\partial x^n})_j+\cdots \quad (2.2.1)$$

对一给定导数的差分近似可以通过 u_j 和 $u_{j+k}(k=\pm1,\pm2,\cdots)$ 的线性组合得到. 例如, 考虑 u_{j+1} 和 u_{j-1} 的 Taylor 展开

$$u_{j+1}=u_j+(\Delta x)(\frac{\partial u}{\partial x})_j+\frac{1}{2}(\Delta x)^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j+\cdots+\frac{1}{n!}(\Delta x)^n(\frac{\partial^n u}{\partial x^n})_j+\cdots \quad (2.2.2)$$

$$u_{j-1}=u_j-(\Delta x)(\frac{\partial u}{\partial x})_j+\frac{1}{2}(\Delta x)^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j-\cdots+\frac{(-1)^n}{n!}(\Delta x)^n(\frac{\partial^n u}{\partial x^n})_j+\cdots \quad (2.2.3)$$

由式 (2.2.2) 得到

$$\frac{u_{j+1}-u_j}{\Delta x}=(\frac{\partial u}{\partial x})_j+\frac{1}{2}(\Delta x)(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j+\cdots \quad (2.2.4)$$

于是只要 Δx 足够小, 表达式 $(u_{j+1}-u_j)/\Delta x$ 就可作为 $(\frac{\partial u}{\partial x})_j$ 的一个合理近似. 类似地, 由 (2.2.3) 式可得

$$\frac{u_j-u_{j-1}}{\Delta x}=(\frac{\partial u}{\partial x})_j-\frac{1}{2}(\Delta x)(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j+\cdots \quad (2.2.5)$$

而由式 (2.2.2) 减去 (2.2.3) 可得

$$\frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2\Delta x}=(\frac{\partial u}{\partial x})_j+\frac{1}{6}(\Delta x)^2(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j+\frac{1}{120}(\Delta x)^4(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j+\cdots \quad (2.2.6)$$

显然,$(u_{j+1}-u_{j-1})/(2\Delta x)$ 可作为一阶导数的另一种近似. 在 (2.2.4) 式中表达式 $(u_{j+1}-u_j)/\Delta x$ 是对 $(\frac{\partial u}{\partial x})_j$ 的一阶近似, 可以记为

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j=\frac{u_{j+1}-u_j}{\Delta x}+O(\Delta x) \quad (2.2.7)$$

类似地, 式 (2.2.5) 和 (2.2.6) 可记为

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j=\frac{u_j-u_{j-1}}{\Delta x}+O(\Delta x) \quad (2.2.8)$$

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j=\frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2\Delta x}+O(\Delta x^2) \quad (2.2.9)$$

称 (2.2.7) 和 (2.2.8) 式为关于 x 的一阶导数的单边差分近似, 称 (2.2.9) 式为关于 x 的一阶导数的中心差分近似 (注: 如无特殊说明, Δx^2 表示 $(\Delta x)^2$, 等等).

对 x 的二阶导数, 由式 (2.2.2) 加上 (2.2.3), 消去一阶导数项, 得

$$\frac{u_{j+1}-2u_j+u_{j-1}}{\Delta x^2}=(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j+\frac{1}{12}(\Delta x)^2(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j+\frac{1}{360}(\Delta x)^6(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6})_j+\cdots \tag{2.2.10}$$

于是得到二阶导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的二阶近似

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j=\frac{u_{j+1}-2u_j+u_{j-1}}{\Delta x^2}+O(\Delta x^2) \tag{2.2.11}$$

如要求得更高阶精度的差分计算, 可由 $u_{j+1}(j=\pm1,\pm2,\cdots)$ 的 Taylor 展开式再通过待定系数法得到. 例如, 考虑二阶导数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 在点 $x=j\Delta x$, $x=(j\pm1)\Delta x$, $x=(j\pm2)\Delta x$ 处的泰勒展开可以得到 4 阶的近似精度. 考虑

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j=c_1u_{j-2}+c_2u_{j-1}+c_3u_j+c_4u_{j+1}+c_5u_{j+2}+O(\Delta x^6) \tag{2.2.12}$$

其中系数 c_1,c_2,c_3,c_4,c_5 待定, 将上式右端各项在 $x=j\Delta x$ 处展成 Taylor 级数, 整理得

$$\begin{aligned}(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j=&[c_1+c_2+c_3+c_4+c_5]u_j\\&+\left[\frac{(-2)}{1!}c_1+\frac{(-1)}{1!}c_2+\frac{(+1)}{1!}c_4+\frac{(+2)}{1!}c_5\right](\Delta x)(\frac{\partial u}{\partial x})_j\\&+\left[\frac{(-2)^2}{2!}c_1+\frac{(-1)^2}{2!}c_2+\frac{(+1)^2}{2!}c_4+\frac{(+2)^2}{2!}c_5\right](\Delta x)^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j\\&+\left[\frac{(-2)^3}{3!}c_1+\frac{(-1)^3}{3!}c_2+\frac{(+1)^3}{3!}c_4+\frac{(+2)^3}{3!}c_5\right](\Delta x)^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j\\&+\left[\frac{(-2)^4}{4!}c_1+\frac{(-1)^4}{4!}c_2+\frac{(+1)^4}{4!}c_4+\frac{(+2)^4}{4!}c_5\right](\Delta x)^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j\\&+\left[\frac{(-2)^5}{5!}c_1+\frac{(-1)^5}{5!}c_2+\frac{(+1)^5}{5!}c_4+\frac{(+2)^5}{5!}c_5\right](\Delta x)^5(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j+O(\Delta x^6)\end{aligned} \tag{2.2.13}$$

令 u_j 及 u_j 的各阶导数项的系数为零, 得线性代数方程组

$$\begin{aligned}c_1+c_2+c_3+c_4+c_5&=0\\-2c_1-c_2+c_4+2c_5&=0\\4c_1+c_2+c_4+4c_5&=0\\-8c_1-c_2+c_4+8c_5&=0\\16c_1+c_2+c_4+16c_5&=0\end{aligned} \tag{2.2.14}$$

由此解得

$$c_1=-\frac{1}{6\Delta x^2},\ c_2=\frac{5}{3\Delta x^2},\ c_3=-\frac{3}{\Delta x^2},\ c_4=\frac{5}{3\Delta x^2},\ c_5=-\frac{1}{6\Delta x^2} \tag{2.2.15}$$

该系数可使 (2.2.13) 式中 $(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j$ 前的系数为零, 从而可得二阶导数的一个四阶精度近似

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{-u_{j-2}+10u_{j-1}-18u_j+10u_{j+1}-u_{j+2}}{6\Delta x^2}+O(\Delta x^6) \tag{2.2.16}$$

故方程 (2.1.1) 的一个精度为 $(\Delta t+\Delta x^4)$ 的格式为

$$u_j^{n+1}=u_j^n+\frac{\nu\Delta t}{6\Delta x^2}(-u_{j-2}^n+10u_{j-1}^n-18u_j^n+10u_{j+1}^n-u_{j+2}^n) \tag{2.2.17}$$

也可能通过系数 $(\Delta x,\Delta t,\nu)$ 的特定选择得到更高阶的差分格式. 差分方程 (2.1.4) 可以表示为

$$u_j^{n+1}=u_j^n+\frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n) \tag{2.2.18}$$

该差分方程对时间和空间都是二阶精度, 因为

$$\begin{aligned}&\frac{\partial u(j\Delta x,n\Delta t)}{\partial t}-\nu\frac{\partial^2 u(j\Delta x,n\Delta t)}{\partial x^2}\\&=\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}-\frac{\nu}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n)+O(\Delta t)+O(\Delta x^2)\end{aligned} \tag{2.2.19}$$

对某些特殊的 Δx 和 Δt 的选择, 差分方程可达到更高的精度, 如在 (2.2.19) 式中保留更多的项, 有

$$\begin{aligned}(\frac{\partial u}{\partial t}-\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n-[\frac{\delta_t^+}{\Delta t}-\frac{\nu\delta_x^2}{\Delta x^2}]u_j^n=&-\frac{\Delta t}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2})_j^n-\frac{\Delta t^2}{3!}(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3})_j^n-\cdots\\&+\nu\{\frac{2\Delta x^2}{4!}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j^n+2\frac{\Delta x^4}{6!}(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6})_j^n+\cdots\}\end{aligned} \tag{2.2.20}$$

这里 $\delta_t^+u_j^n=u_j^{n+1}-u_j^n$, $\delta_x^2u_j^n=u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n$. 利用

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\quad 及\quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\nu^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$$

可将式 (2.2.20) 改写成

$$\begin{aligned}&(\frac{\partial u}{\partial t}-\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n-[\frac{\delta_t^+}{\Delta t}-\frac{\nu}{\Delta x^2}\delta_x^2]u_j^n\\&=-\frac{\Delta t}{2}\nu^2(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j^n-\frac{\Delta t^2}{3!}(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3})_j^n+\nu\frac{2\Delta x^2}{4!}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j^n+\nu[2\frac{\Delta x^4}{6!}(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6})_j^n+\cdots]\\&=\nu(-\nu\frac{\Delta t}{2}+2\frac{\Delta x^2}{4!})(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j^n+O(\Delta t^2)+O(\Delta x^4)\end{aligned} \tag{2.2.21}$$

因此, 若选择 $\Delta t=\frac{\Delta x^2}{6\nu}$, 则可得一个时间为二阶精度、空间为四阶精度的格式.

§2.3 矩阵差分算子

考虑关系式

$$(\delta_x^2 u)_j = \frac{1}{\Delta x^2}(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) \tag{2.3.1}$$

这是二阶导数的中心差分近似，为建立矩阵差分算子，考虑 Dirichlet 边界条件，$u(a) = u_a$，$u(b) = u_b$，并考虑下面的四个网格点，其中边界点是 a 和 b. 如图 2.2，取 $\Delta x = \dfrac{b-a}{M+1}$，$M = 4$，共有 4 个内结点. 在每一个内点上，由 (2.3.1) 式得到

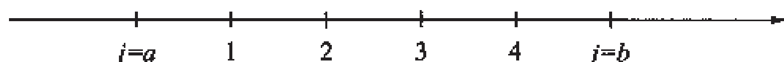


图 2.2 两个边界点，四个内结点的网格剖分

$$\begin{aligned}
(\delta_x^2 u)_1 &= \frac{1}{\Delta x^2}(u_a - 2u_1 + u_2) \\
(\delta_x^2 u)_2 &= \frac{1}{\Delta x^2}(u_1 - 2u_2 + u_3) \\
(\delta_x^2 u)_3 &= \frac{1}{\Delta x^2}(u_2 - 2u_3 + u_4) \\
(\delta_x^2 u)_4 &= \frac{1}{\Delta x^2}(u_3 - 2u_4 + u_b)
\end{aligned} \tag{2.3.2}$$

引进

$$\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}, \quad \widetilde{\boldsymbol{F}} = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{bmatrix} u_a \\ 0 \\ 0 \\ u_b \end{bmatrix}, \quad A = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & 1 & -2 \end{bmatrix} \tag{2.3.3}$$

则 (2.3.2) 可改写成

$$\delta_x^2 \boldsymbol{u} = A\boldsymbol{u} + \widetilde{\boldsymbol{F}} \tag{2.3.4}$$

于是这个具有 4 个网格点的具有 Dirichlet 边界条件的一阶和二阶导数的矩阵差分算子可分别记为

$$\delta_x = \frac{1}{2\Delta x}\begin{bmatrix} 0 & 1 & & \\ -1 & 0 & 1 & \\ & -1 & 0 & 1 \\ & & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \delta_x^2 = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & 1 & -2 \end{bmatrix} \tag{2.3.5}$$

矩阵的每一行表示一阶和二阶导数的三点中心差分近似. 对 Neumann 边界条件，例如右边界

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{x=b} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_b$$

在 (2.3.2) 式中的第四式变成

$$(\delta_x^2 u)_4 = \frac{2}{3}\frac{1}{\Delta x}(\frac{\partial u}{\partial x})_b - \frac{2}{3}\frac{1}{\Delta x^2}(u_4 - u_3)$$

这里用到了边界上的差分近似, 见下一小节. 于是, 对右边界是 Neumann 条件的二阶近似的三点中心差分的矩阵算子是

$$\delta_x^2 = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \end{bmatrix} \tag{2.3.6}$$

§2.4 导数的算子表示

下面推导一阶导数和二阶导数的线性算子表示方法. 定义如下差分算子

$$\Delta_x \text{ 前差算子} \quad \Delta_x u_j = u_{j+1} - u_j \tag{2.4.1}$$

$$\nabla_x \text{ 后差算子} \quad \nabla_x u_j = u_j - u_{j-1} \tag{2.4.2}$$

$$\delta_x \text{ 中心差分算子} \quad \delta_x u_j = u_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}} \tag{2.4.3}$$

$$T_x \text{ 移位算子} \quad T_x u_j = u_{j+1} \tag{2.4.4}$$

$$\mu_x \text{平均算子} \quad \mu_x u_j = \frac{1}{2}(u_{j+\frac{1}{2}} + u_{j-\frac{1}{2}}) \tag{2.4.5}$$

$$D_x \text{ 一阶偏导数算子} \quad D_x = \frac{\partial}{\partial x} \tag{2.4.6}$$

$$I \text{ 恒等算子} \quad I u_j = u_j \tag{2.4.7}$$

根据上面定义, 前差、后差和中心差分算子均可用移位算子来表示. 由

$$\begin{aligned} \Delta_x u_j &= u_{j+1} - u_j = T_x u_j - I u_j = (T_x - I)u_j \\ &\Rightarrow \Delta_x = T_x - I \quad \text{或} \quad T_x = I + \Delta_x \end{aligned} \tag{2.4.8}$$

$$\begin{aligned} \nabla_x u_j &= u_j - u_{j-1} = I u_j - T_x^{-1} u_j = (I - T_x^{-1})u_j \\ &\Rightarrow \nabla_x = I - T_x^{-1} \quad \text{或} \quad T_x = (I - \nabla_x)^{-1} \end{aligned} \tag{2.4.9}$$

$$\begin{aligned} \delta_x u_j &= u_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}} = T_x^{\frac{1}{2}} u_j - T_x^{-\frac{1}{2}} u_j = (T_x^{\frac{1}{2}} - T_x^{-\frac{1}{2}})u_j \\ &\Rightarrow \delta_x = T_x^{\frac{1}{2}} - T_x^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{2.4.10}$$

$$\begin{aligned} \delta_x^2 u_j &= u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1} = (T_x - 2I - T_x^{-1})u_j \\ &\Rightarrow \delta_x^2 = T_x - 2I + T_x^{-1} \end{aligned} \tag{2.4.11}$$

$$\mu_x\delta_x u_j = \mu_x(u_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2}(u_{j+1} - u_{j-1}) = \frac{1}{2}(T_x - T_x^{-1})u_j$$
$$\Rightarrow \mu_x\delta_x = \frac{1}{2}(T_x - T_x^{-1}) \tag{2.4.12}$$

$$\mu_x^2 u_j = \frac{1}{2}\mu_x(u_{j+\frac{1}{2}} + u_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{1}{4}(u_{j+1} + 2u_j + u_{j-1})$$
$$= \frac{1}{4}(T_x + 2I + T_x^{-1})u_j \Rightarrow \mu_x^2 = \frac{1}{4}(T_x + 2I + T_x^{-1}) \tag{2.4.13}$$

将 (2.4.11) 式与 (2.4.12) 式相加得

$$T_x = I + \frac{1}{2}\delta_x^2 + \mu_x\delta_x \tag{2.4.14}$$

现将 u_{j+1} 在 u_j 处作 Taylor 展开, 得

$$\begin{aligned} u_{j+1} &= u_j + h(\frac{\partial u}{\partial x})_j + \frac{h^2}{2!}(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j + \frac{h^3}{3!}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j + \cdots \\ &= [I + \frac{h}{1!}D_x + \frac{h^2}{2!}D_x^2 + \frac{h^3}{3!}D_x^3 + \cdots]u_j \\ &= e^{hD_x}u_j \end{aligned} \tag{2.4.15}$$

其中 $D_x = \dfrac{\partial}{\partial x}, D_x^2 = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}, \cdots$, 为偏导数算子, h 为空间步长. 于是有

$$T_x = e^{hD_x} \quad 或 \quad D_x = \frac{1}{h}\ln T_x \tag{2.4.16}$$

由 T_x 的表达式 (2.4.8)~(2.4.10) 和 (2.4.14) 式知, 一阶偏导数算子可用前差、后差、中心和平均差分算子表示. 将 (2.4.8) 式和 (2.4.9) 式分别代入 (2.4.16) 式中, 可得 D_x 的前差、后差差分算子表示, 分别为

$$D_x = \frac{1}{h}\ln T_x = \frac{1}{h}\ln(I + \Delta_x) = \frac{1}{h}[\Delta_x - \frac{1}{2}\Delta_x^2 + \frac{1}{3}\Delta_x^3 - \cdots] \tag{2.4.17}$$

$$D_x = \frac{1}{h}\ln T_x = \frac{1}{h}\ln(I - \nabla_x)^{-1} = \frac{1}{h}[\nabla_x + \frac{1}{2}\nabla_x^2 + \frac{1}{3}\nabla_x^3 + \cdots] \tag{2.4.18}$$

将 (2.4.14) 式代入 (2.4.16) 式中, 可得 D_x 的平均差分算子表示

$$D_x = \frac{1}{h}\ln[I + (\frac{1}{2}\delta_x^2 + \mu_x\delta_x)] = \frac{1}{h}\mu_x[\delta_x - \frac{1}{6}\delta_x^3 + \frac{1}{30}\delta_x^5 - \cdots] \tag{2.4.19}$$

由 (2.4.10) 式和 (2.4.16) 式得

$$\delta_x = e^{\frac{1}{2}hD_x} - e^{-\frac{1}{2}hD_x} = 2\sinh(\frac{h}{2}D_x)$$

从而

$$D_x = \frac{2}{h}\sinh^{-1}(\frac{\delta_x}{2}) = \frac{1}{h}[\delta_x - \frac{1}{24}\delta_x^3 + \frac{3}{640}\delta_x^5 - \cdots] \tag{2.4.20}$$

有了 D_x 的各种表达式 (2.4.17)~(2.4.20), 即

$$D_x = \frac{1}{h}\begin{cases} \Delta_x - \frac{1}{2}\Delta_x^2 + \frac{1}{3}\Delta_x^3 - \cdots \\ \nabla_x + \frac{1}{2}\nabla_x^2 + \frac{1}{3}\nabla_x^3 + \cdots \\ \mu_x\delta_x - \frac{1}{6}\mu_x\delta_x^3 + \frac{1}{30}\mu_x\delta_x^5 - \cdots \\ \delta_x - \frac{1}{24}\delta_x^3 + \frac{3}{640}\delta_x^5 - \cdots \end{cases} \tag{2.4.21}$$

就可得到二阶或更高阶的偏导数算子的表达式. 例如, 对二阶偏导数算子 $D_x^2 = D_xD_x$, 有

$$D_x^2 = \frac{1}{h^2}\begin{cases} \Delta_x^2 - \Delta_x^3 + \frac{11}{12}\Delta_x^4 - \frac{5}{6}\Delta x^5 + \cdots \\ \nabla_x^2 + \nabla_x^3 + \frac{11}{12}\nabla_x^4 + \frac{5}{6}\nabla x^5 \cdots \\ \mu_x^2\delta_x^2 - \frac{1}{3}\mu_x^2\delta_x^4 + \frac{17}{180}\mu_x^2\delta_x^6 - \cdots, \\ \delta_x^2 - \frac{1}{12}\delta_x^4 + \frac{1}{90}\delta_x^6 - \cdots \end{cases} \tag{2.4.22}$$

一般地, r 阶偏导数算子可表示为

$$D_x^r = \frac{1}{h^r}\begin{cases} \Delta_x^r - \frac{r}{2}\Delta_x^{r+1} + \frac{r(3r+5)}{24}\Delta_x^{r+2} - \cdots \\ \nabla_x^r + \frac{r}{2}\nabla_x^{r+1} + \frac{r(3r+5)}{24}\nabla_x^{r+2} + \cdots \\ \mu_x\delta_x^r - \frac{r+3}{24}\mu_x\delta_x^{r+2} + \frac{5r^2+52r+135}{5760}\mu_x\delta_x^{r+4} - \cdots \quad (r\text{为奇数}) \\ \delta_x^2 - \frac{r}{24}\delta_x^{r+2} + \frac{r(5r+22)}{5760}\delta_x^{r+4} - \cdots \quad (r\text{为偶数}) \end{cases} \tag{2.4.23}$$

由上面的表达式还可导出导数算子的 Padé 差分近似, 分别取上面 D_x 表达式 (2.4.21) 中前两项, 得

$$D_x = \frac{1}{h}[\Delta_x - \frac{\Delta_x^2}{2} + O(\Delta_x^3)] = \frac{1}{h}\frac{\Delta_x}{1+\frac{\Delta_x}{2}} + O(h^2) \tag{2.4.24}$$

$$D_x = \frac{1}{h}[\nabla_x + \frac{\nabla_x^2}{2} + O(\nabla^3 x)] = \frac{1}{h}\frac{\nabla_x}{1-\frac{\nabla_x}{2}} + O(h^2) \tag{2.4.25}$$

$$D_x = \frac{1}{h}[\mu_x\delta_x - \frac{1}{6}\mu_x\delta_x^3 + O(\delta_x^5)] = \frac{1}{h}\frac{\mu_x\delta_x}{1+\frac{\delta_x^2}{6}} + O(h^4) \tag{2.4.26}$$

$$D_x = \frac{1}{h}[\delta_x - \frac{1}{24}\delta_x^3 + O(\delta_x^5)] = \frac{1}{h}\frac{\delta_x}{1+\dfrac{\delta_x^2}{24}} + O(h^4) \tag{2.4.27}$$

因此得到了一阶导数算子的前差、后差和中心差分算子表示，其中前两式即 (2.4.24)~(2.4.25) 式有二阶精度，后两式即 (2.4.26)~(2.4.27) 式有四阶精度. 类似地，对二阶导数算子，有三种算子的 Padé 差分形式

$$D_x^2 = \begin{cases} \dfrac{1}{h^2}\dfrac{\Delta_x}{1+\Delta_x} + O(h^2) \\ \dfrac{1}{h^2}\dfrac{\nabla_x}{1-\nabla_x} + O(h^2) \\ \dfrac{1}{h^2}\dfrac{\mu_x^2\delta_x^2}{1+\dfrac{1}{3}\delta_x^2} + O(h^4) \\ \dfrac{1}{h^2}\dfrac{\delta_x}{1+\dfrac{1}{12}\delta_x} + O(h^4) \end{cases} \tag{2.4.28}$$

§2.5　任何阶精度差分格式的建立

§2.5.1　Taylor 级数表

函数在某一点的 Taylor 展开可用于建立任意阶精度的有限差分算子. 一种简明的方法是作一张 “Taylor 级数表”. 表 2.1 是三个点的二阶导数近似，其中导数在中点计算. 我们要求解表达式

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j - \frac{1}{\Delta x^2}(au_{j-1} + bu_j + cu_{j+1}) = ? \tag{2.5.1}$$

表 2.1　三点二阶导数近似的 Taylor 级数表

求和项	u_j	$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	$\Delta x^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j$	$\Delta x^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j$	$\Delta x^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j$
$\Delta x^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j$	0	0	1	0	0
$-au_{j-1}$	$-a$	$-a(-1)\frac{1}{1}$	$-a(-1)^2\frac{1}{2}$	$-a(-1)^3\frac{1}{6}$	$-a(-1)^4\frac{1}{24}$
$-bu_j$	$-b$	0	0	0	0
$-cu_{j+1}$	$-c$	$-c(1)\frac{1}{1}$	$-c(1)^2\frac{1}{2}$	$-c(1)^3\frac{1}{6}$	$-c(1)^4\frac{1}{24}$

注意 (2.5.1) 式中的所有项在表的左列 (已经乘以 Δx^2 以简化表中的项). 表中每一列的第一项是这一列中的公共因子, 即为

$$\Delta x^k(\frac{\partial^k u}{\partial x^k})_j, \quad k=0,1,2,\cdots$$

每一行构成一个 Taylor 展开, 例如最后一行相应于 $-cu_{j+1}$ 的 Taylor 展开

$$\begin{aligned}-cu_{j+1} = -cu_j - c(1)\frac{1}{1}\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j - c(1)^2\frac{1}{2}\Delta x^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j \\ -c(1)^3\frac{1}{6}\Delta x^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j - c(1)^4\frac{1}{24}\Delta x^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j - \cdots\end{aligned} \tag{2.5.2}$$

对表中的每一列进行求和, 为得到近似的最大阶数, 从左向右进行, 通过取适当的 a, b, c, 使前三列之和为零, 即

$$\begin{bmatrix}-1 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a \\ b \\ c\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 \\ 0 \\ -2\end{bmatrix}$$

由该方程解得 $a=1, b=-2, c=1$. 求和不为零的列构成截断误差. 第一个不为零的求和的列, 称为**截断误差首项**, 用 R_j 表示. 在表 2.1 中, R_j 在第 5 列中出现, 于是

$$R_j = -\frac{1}{\Delta x^2}(\frac{-a}{24}+\frac{-c}{24})\Delta x^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j = \frac{\Delta x^2}{12}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j \tag{2.5.3}$$

注意到已除以 Δx^2 以使误差项与 (2.5.1) 式中的表示一致. 因此我们得到熟悉的关于二阶导数的三点中心差分格式

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j - \frac{1}{\Delta x^2}(u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}) = O(\Delta x^2) \tag{2.5.4}$$

现考虑一阶导数的三点向后差分近似

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j - \frac{1}{\Delta x}(a_2 u_{j-2} + a_1 u_{j-1} + b u_j) = ?$$

其 Taylor 级数表见表 2.2. 令其中的前三列求和为零, 得到

$$\begin{bmatrix}-1 & -1 & -1 \\ 2 & 1 & 0 \\ -4 & -1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_2 \\ a_1 \\ b\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 \\ -1 \\ 0\end{bmatrix}$$

解得 $(a_2, a_1, b) = \frac{1}{2}(1, -4, 3)$. 这时第四列给出截断误差首项

$$R_j = -\frac{1}{\Delta x}(\frac{8a_2}{6}+\frac{a_1}{6})\Delta x^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j = -\frac{\Delta x^2}{3}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j \tag{2.5.5}$$

由此得到一阶导数的二阶精度的向后差分近似

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j - \frac{1}{2\Delta x}(u_{j-2} - 4u_{j-1} + 3u_j) = O(\Delta x^2) \tag{2.5.6}$$

表 2.2 一阶导数的三点向后近似的 Taylor 级数表

求和项	u_j	$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	$\Delta x^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j$	$\Delta x^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j$	$\Delta x^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j$
$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	0	1	0	0	0
$-a_2u_{j-2}$	$-a_2$	$-a_2(-2)\frac{1}{1}$	$-a_2(-2)^2\frac{1}{2}$	$-a_2(-2)^3\frac{1}{6}$	$-a_2(-2)^4\frac{1}{24}$
$-a_1u_{j-1}$	$-a_1$	$-a_1(-1)\frac{1}{1}$	$-a_1(-1)^2\frac{1}{2}$	$-a_1(-1)^3\frac{1}{6}$	$-a_1(-1)^4\frac{1}{24}$
$-bu_j$	$-b$	0	0	0	0

由该方法还可以求得导数更高阶精度的差分近似. 如考虑一阶导数的五点中心差分近似. 设

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j - \frac{1}{\Delta x}(au_{j-2} + bu_{j-1} + cu_j + du_{j+1} + eu_{j+2}) = ? \tag{2.5.7}$$

建立如下 Taylor 级数表 2.3.

表 2.3 一阶导数的五点中心差分近似 Taylor 级数表

求和项	u_j	$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	$\Delta x^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j$	$\Delta x^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j$	$\Delta x^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j$	$\Delta x^5(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j$
$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	0	1	0	0	0	0
$-au_{j-2}$	$-a$	$-a(-2)\frac{1}{1}$	$-a(-2)^2\frac{1}{2}$	$-a(-2)^3\frac{1}{6}$	$-a(-2)^4\frac{1}{24}$	$-a(-2)^5\frac{1}{120}$
$-bu_{j-1}$	$-b$	$-b(-1)\frac{1}{1}$	$-b(-1)^2\frac{1}{2}$	$-b(-1)^3\frac{1}{6}$	$-b(-1)^4\frac{1}{24}$	$-b(-1)^5\frac{1}{120}$
$-cu_j$	$-c$	0	0	0	0	0
$-du_{j+1}$	$-d$	$-d(1)\frac{1}{1}$	$-b(1)^2\frac{1}{2}$	$-d(1)^3\frac{1}{6}$	$-d(1)^4\frac{1}{24}$	$-d(1)^5\frac{1}{120}$
$-eu_{j+2}$	$-e$	$-e(2)\frac{1}{1}$	$-e(2)^2\frac{1}{2}$	$-e(2)^3\frac{1}{6}$	$-e(2)^4\frac{1}{24}$	$-e(2)^5\frac{1}{120}$

对表 2.3 中的每一列进行求和, 使前 5 列均为零, 得到方程

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.5.8}$$

解得

$$(a, b, c, d, e)^T = (\frac{1}{12}, -\frac{8}{12}, 0, \frac{8}{12}, -\frac{1}{12})^T$$

截断误差首项 R_j 为

$$R_j = -\frac{1}{\Delta x}(32a + b - d - 32e)\Delta x^5(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j = \frac{4}{3}\Delta x^4(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j \tag{2.5.9}$$

于是得到一阶导数五点四阶精度格式

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{u_{j-2} - 8u_{j-1} + 8u_{j+1} - u_{j+2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4) \tag{2.5.10}$$

例 1 求一阶导数的四点四阶中心差分格式.

解 考虑如下近似

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j - \frac{au_{j-2} + bu_{j-1} + cu_{j+1} + du_{j+2}}{\Delta x} = ?$$

建立如下 Taylor 级数表 2.4.

表 2.4 一阶导数的四点中心差分近似的 Taylor 级数表

求和项	u_j	$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	$\Delta x^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j$	$\Delta x^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j$	$\Delta x^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j$	$\Delta x^5(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j$
$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	0	1	0	0	0	0
$-au_{j-2}$	$-a$	$-a(-2)\frac{1}{1}$	$-a(-2)^2\frac{1}{2}$	$-a(-2)^3\frac{1}{6}$	$-a(-2)^4\frac{1}{24}$	$-a(-2)^5\frac{1}{120}$
$-bu_{j-1}$	$-b$	$-b(-1)\frac{1}{1}$	$-b(-1)^2\frac{1}{2}$	$-b(-1)^3\frac{1}{6}$	$-b(-1)^4\frac{1}{24}$	$-b(-1)^5\frac{1}{120}$
$-cu_{j+1}$	$-c$	$-c(1)\frac{1}{1}$	$-c(1)^2\frac{1}{2}$	$-c(1)^3\frac{1}{6}$	$-c(1)^4\frac{1}{24}$	$-c(1)^5\frac{1}{120}$
$-du_{j+2}$	$-d$	$-d(2)\frac{1}{1}$	$-d(2)^2\frac{1}{2}$	$-d(2)^3\frac{1}{6}$	$-d(2)^4\frac{1}{24}$	$-d(2)^5\frac{1}{120}$

令表 2.4 中前 4 列的系数之和为零, 得

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 1 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.5.11}$$

解得

$$(a, b, c, d)^T = (\frac{1}{12}, -\frac{8}{12}, \frac{8}{12}, -\frac{1}{12})^T$$

将该值代入第 5 列, 得截断误差首项 R_j 为

$$R_j = -\frac{1}{120}(32a + b - c - 32d)\Delta x^4(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j = -\frac{1}{30}\Delta x^4(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j \tag{2.5.12}$$

于是得到一阶导数 4 点四阶精度格式

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{u_{j-2} - 8u_{j-1} + 8u_{j+1} - u_{j+2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4) \tag{2.5.13}$$

§2.5.2 差分近似的推广

一般地, 在结点 j 处的 m 阶导数的差分近似可以写成 $p+q+1$ 个相邻点的形式

$$(\frac{\partial^m u}{\partial x^m})_j - \sum_{i=-p}^{q} a_i u_{j+i} = R_j \tag{2.5.14}$$

其中 a_i 是待定系数. 显然, 通过 Taylor 级数表可以求得这些系数, 求得任意阶导数的向前、向后、不对称或中心差分算子, 也可以推广到高维情形. 更一般地, 系数可以由插值方法得到. 下面考虑 Lagrange 和 Hermite 插值多项式. Lagrange 多项式由下式给出

$$u(x) = \sum_{k=0}^{K} a_k(x) u_k \tag{2.5.15}$$

这里 $a_k(x)$ 是自由度为 K 的 x 的多项式. 对非等间隔点的二次插值, $a_k(x)$ 的构造可以从简单的 Lagrange 插值 (或外推) 得到

$$u(x) = u_0 \frac{(x_1-x)(x_2-x)}{(x_1-x_0)(x_2-x_0)} + u_1 \frac{(x_0-x)(x_2-x)}{(x_0-x_1)(x_2-x_1)} + u_2 \frac{(x_0-x)(x_1-x)}{(x_0-x_2)(x_1-x_2)} \tag{2.5.16}$$

注意当 $x=x_k$ 时, u_k 的系数为 1, 当 x 取其他离散点时, u_k 的系数为 0. 若取等间距网格, 对 $u(x)$ 取一阶或二阶导数, 并在适当的点上计算这些导数, 可以导出前面给出的有限差分近似公式. 因此前面的用 Taylor 级数表构造差分近似的方法源于 Lagrange 插值公式的显式差分算子. 例如, 求一阶导数得

$$\frac{\partial u}{\partial x} = u_0 \frac{2x-(x_1+x_2)}{2h^2} + \frac{2x-(x_0+x_2)}{h^2} + u_2 \frac{2x_1-(x_1+x_0)}{2h^2}$$

其中 h 为网格间隔. 令 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 在 x_1 处取值, 便得中心差分格式

$$\frac{\partial u}{\partial x}|_{x=x_1} = \frac{u_2-u_1}{2h}$$

由 (2.5.15) 式导出的有限差分公式称为 **Lagrange 近似**.

使用 Hermite 插值可以对 Lagrange 插值方法进行推广. 为构造关于 $u(x)$ 的一个多项式, Hermite 公式使用给定结点处的函数值和某些导数值. 使用函数值及其一阶导数的表达式为

$$u(x) = \sum a_k(x) u_k + \sum b_k(x) (\frac{\partial u}{\partial x})_k \tag{2.5.17}$$

下面对 Hermite 插值公式的一阶导数, 使用 Taylor 级数表构造一个隐式格式, 式 (2.5.17) 可推广到包括相邻点的导数, 即

$$\sum_{i=-r}^{S} b_i (\frac{\partial^m u}{\partial x^m})_{j+i} - \sum_{i=-p}^{q} a_i u_{j+i} = R_j \tag{2.5.18}$$

对一阶导数的三点中心 Hermite 近似可表示为 (已将 j 点的一阶导数的系数取为 1, 以简化计算)

$$d(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-1}+(\frac{\partial u}{\partial x})_j+e(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+1}-\frac{1}{\Delta x}(au_{j-1}+bu_j+cu_{j+1})=? \tag{2.5.19}$$

表 2.5 是一阶导数的中心三点 Hermite 近似, 表中不仅包括了在结点 j 处的导数, 还包括了在结点 $j-1$ 和 $j+1$ 处的导数, 它们也必须用结点 j 处的 Taylor 级数来展开, 这要求 (2.2.2) 中的 Taylor 展开式推广为

$$(\frac{\partial^m u}{\partial x^m})_{j+k}=\left\{[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(k\Delta x)^n\frac{\partial^n}{\partial x^n}](\frac{\partial^m u}{\partial x^m})\right\}_j \tag{2.5.20}$$

表 2.5 一阶导数的三点中心 Hermite 近似的 Taylor 级数表

求和项	u_j	$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	$\Delta x^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j$	$\Delta x^3(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j$	$\Delta x^4(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j$	$\Delta x^5(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j$
$\Delta xd(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-1}$	0	d	$d(-1)\frac{1}{1}$	$d(-1)^2\frac{1}{2}$	$d(-1)^3\frac{1}{6}$	$d(-1)^4\frac{1}{24}$
$\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j$	0	1	0	0	0	0
$\Delta xe(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+1}$	0	e	$e(1)\frac{1}{1}$	$e(1)^2\frac{1}{2}$	$e(1)^3\frac{1}{6}$	$e(1)^4\frac{1}{24}$
$-au_{j-1}$	$-a$	$-a(-1)\frac{1}{1}$	$-a(-1)^2\frac{1}{2}$	$-a(-1)^3\frac{1}{6}$	$-a(-1)^4\frac{1}{24}$	$-a(-1)^5\frac{1}{120}$
$-bu_j$	$-b$	0	0	0	0	0
$-cu_{j+1}$	$-c$	$-c(1)\frac{1}{1}$	$-c(1)^2\frac{1}{2}$	$-c(1)^3\frac{1}{6}$	$-c(1)^4\frac{1}{24}$	$-c(1)^5\frac{1}{120}$

为达到最大阶的精度, 必须满足

$$\begin{bmatrix}-1&1&-1&0&0\\1&0&-1&1&1\\-1&0&-1&-2&2\\1&0&-1&3&3\\-1&0&-1&-4&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\\c\\d\\e\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\-1\\0\\0\\0\end{bmatrix}$$

求得

$$(a,b,c,d,e)^T=(-\frac{3}{4},0,\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})^T$$

截断误差主项为

$$R_j=-(\frac{d+e}{24}+\frac{a-c}{120})\Delta x^4(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j=-\frac{\Delta x^4}{120}(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5})_j \tag{2.5.21}$$

因此, 所得的表达式为

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-1}+4(\frac{\partial u}{\partial x})_j+(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+1}-\frac{3}{\Delta x}(u_{j-1}-u_{j+1})=O(\Delta x^4) \tag{2.5.22}$$

该式也称为 **Padé 格式**或**紧致格式**.

§2.6 有限体积法

有了导数的各阶近似表达式就可直接代替偏微分方程中的导数. 前面我们用近似导数的方法推导了差分方程. 这一节我们将结合物理守恒律来推导差分格式. 该方法是有限体积法的一个基本应用. 为了解守恒律我们首先推导描述热流模型的一个非齐次偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+F(x,t) \tag{2.6.1}$$

该方程用来刻画有界区间 $D=(0,1)$ 中的一个热传导固体. 设 $u=u(x,t)$ 是在点 $x\in\bar{D}$(D 的闭包) 和时间 $t\geqslant 0$ 处的温度, $R=(a,b)$ 是 D 的任意但固定的一个子区间, a 和 b 为子区间的边界, 则 R 上的总热容量为

$$Q=\int_R c\rho u(x,t)dx$$

其中常数 ρ 和 c 分别为固体的密度和比热, 在 R 上的总热容量的时间变化率是

$$\frac{dQ}{dt}=\int_R\frac{\partial}{\partial t}(c\rho u)dx \tag{2.6.2}$$

设 $\tilde{F}(x,t)$(源密度) 是在点 $x\in R$ 和时间 $t>0$ 时的单位时间单位体积产生的热量, 则由于 F 所致的热容量的变化率是

$$\int_R\tilde{F}(x,t)dx \tag{2.6.3}$$

根据 Fourier 热传导定律, 跨过边界 R 的热通量 q(单位时间单位面积跨过边界 ∂R 的热流量) 正比于温度梯度的法向分量, 即

$$q(a)=-\kappa(a,u)\frac{\partial u}{\partial x}(a,t),\qquad q(b)=\kappa(b,u)\frac{\partial u}{\partial x}(b,t) \tag{2.6.4}$$

其中 $\kappa=\kappa(x,u)$ 是热导率.

因总热容量的时间变化率等于外部热源所致的热容量的变化率与跨过边界 R 的热通量之和, 所以由 (2.6.2)~(2.6.4) 式得

$$\int_R c\rho\frac{\partial u}{\partial t}dx=\int_R\tilde{F}(x,t)dx+(\kappa\frac{\partial u}{\partial x})(b,t)-(\kappa\frac{\partial u}{\partial x})(a,t) \tag{2.6.5}$$

注意

$$(\kappa\frac{\partial u}{\partial x})(b)-(\kappa\frac{\partial u}{\partial x})(a)=\int_R(\kappa u_x)_x dx \tag{2.6.6}$$

则 (2.6.5) 式可写成

$$\int_R[c\rho\frac{\partial u}{\partial t}-(\kappa\frac{\partial u}{\partial x})_x-\tilde{F}]dx=0 \tag{2.6.7}$$

由于区间 R 任意且被积函数连续, 所以

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t}-(\kappa\frac{\partial u}{\partial x})_x-\tilde{F}=0 \tag{2.6.8}$$

假定 κ 是常数, 由该式即得方程 (2.6.1), 其中 $\nu=\dfrac{\kappa}{c\rho},F=\dfrac{\tilde{F}}{c\rho}$. 方程 (2.6.5) 是方程 (2.6.1) 的守恒律的积分形式. 下面应用该积分形式导出方程 (2.6.1) 的差分方程.

假定 c,ρ,κ 都是常数, 并取 $R=(x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}})$, 则由式 (2.6.5) 得

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}\frac{\partial u}{\partial t}dx=\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}Fdx+\nu[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}] \tag{2.6.9}$$

注意方程两端仍是 t 的连续函数, 两端从 $t_n=\Delta t$ 到 $t_{n+1}=(n+1)\Delta t$ 对时间 t 积分, 得

$$\begin{aligned}\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}\frac{\partial u}{\partial t}dxdt&=\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}\int_{t_n}^{t_{n+1}}\frac{\partial u}{\partial t}dtdx=\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx\\&=\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}F(x,t)dxdt+\nu\int_{t_n}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt\end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned}&\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx\\=&\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}F(x,t)dxdt+\nu\int_{t_n}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt\end{aligned} \tag{2.6.10}$$

该方程与方程 (2.6.1) 等价, 是精确方程. 对上式中的积分作近似

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}F(x,t)dxdt=\Delta x\Delta tF_j^n+O(\Delta x^3\Delta t)+O(\Delta t^2+\Delta x) \tag{2.6.11}$$

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx=\Delta x(u_j^{n+1}-u_j^n)+O(\Delta t\Delta x^3) \tag{2.6.12}$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt=\Delta t[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}^n-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}^n]+O(\Delta t^2\Delta x) \tag{2.6.13}$$

再将 $(\frac{\partial u}{\partial x})^n_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})^n_{j-\frac{1}{2}}$ 在 x_j 处作 Taylor 展开, 得

$$\begin{aligned}(\frac{\partial u}{\partial x})^n_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})^n_{j-\frac{1}{2}}&=\Delta x(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})^n_j+O(\Delta x^3)=\Delta x(\frac{\delta_x^2 u_j^n}{\Delta x^2}+O(\Delta x^2))+O(\Delta x^3)\\&=\frac{1}{\Delta x}\delta_x^2 u_j^n+O(\Delta x^3)\end{aligned}\tag{2.6.14}$$

将 (2.6.11)~(2.6.14) 式代入 (2.6.10) 式, 得

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}=F_j^n+\frac{\nu\delta_x^2 u_j^n}{\Delta x^2}+O(\Delta t+\Delta x^2)\tag{2.6.15}$$

去掉截断误差得差分格式

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}=\frac{\nu}{\Delta x^2}\delta_x^2 u_j^n+F_j^n\tag{2.6.16}$$

该格式近似方程的误差为 $O(\Delta t+\Delta x^2)$. 注意用中矩形公式近似关于 x 的积分, 具有 $O(\Delta x^3)$ 阶精度, 用左矩形公式近似关于 t 的积分, 具有 $O(\Delta t^2)$ 阶精度. 另外, (2.6.12) 式中的被积函数关于 t 是一阶精度, 从而对 x 的积分用中矩形近似后导致 $O(\Delta t\Delta x^3)$ 阶精度.

如果对方程 (2.6.9) 在不同的时间区间上积分, 则可得不同的差分格式. 例如将方程 (2.6.9) 两端从 t_{n-1} 到 t_{n+1} 积分, 得

$$\begin{aligned}\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}\frac{\partial u}{\partial t}dxdt&=\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}\frac{\partial u}{\partial t}dtdx=\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx\\&=\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}F(x,t)dxdt+\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt\end{aligned}\tag{2.6.17}$$

对上式中的积分进行近似

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^{n-1})dx=\Delta x(u_j^{n+1}-u_j^{n-1})+O(\Delta t\Delta x^2)$$

$$\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}F(x,t)dxdt=2\Delta x\Delta tF_j^n+O(\Delta x^3\Delta t)+O(\Delta t^2\Delta x)$$

$$\begin{aligned}\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt&=2\Delta t[(\frac{\partial u}{\partial x})^n_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})^n_{j-\frac{1}{2}}]+O(\Delta t^2\Delta x)\\&=\frac{2\Delta t}{\Delta x}\delta_x^2 u_j^n+O(\Delta t\Delta x^3)+O(\Delta t^2\Delta x)\end{aligned}$$

将这些近似式代入 (2.6.17) 可得相应的差分格式为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\Delta t}=\frac{\nu}{\Delta x^2}\delta_x^2 u_j^n+F_j^n\tag{2.6.18}$$

近似方程的误差也为 $O(\Delta t+\Delta x^2)$. 然而, 该格式不收敛. 因此, 用守恒律方法导出的格式不能保证一定是一个好的格式. 不难验证, (2.6.15) 式与 (2.6.18) 式也可直接对方程 (2.6.1) 中的偏导数差分近似得到.

在用有限体积法推导差分格式的过程中, 还可用**单元平均法**对其中的积分进行近似. 考虑方程 (2.6.9), 即

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}(u^{n+1}-u^n)dx=\int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}F(x,t)dxdt+\nu\int_{t_n}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt \tag{2.6.19}$$

现令 $\bar{u}_j^n$ 是 $u(x,t_n)$ 在第 j 个单元上的单元平均, 即

$$\bar{u}_j^n=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}u(x,t_n)dx=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}u^n(x)dx \tag{2.6.20}$$

F_j 是 F 在第 j 个单元上的平均

$$F_j=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}F(x,t)dx \tag{2.6.21}$$

则由式 (2.6.19) 得

$$\Delta x(\bar{u}_j^{n+1}-\bar{u}_j^n)=\Delta x\int_{t_n}^{t_{n+1}}F_jdt+\nu\int_{t_n}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt \tag{2.6.22}$$

方程 (2.6.22) 与方程 (2.6.5) 等价, 是一个精确的方程. 下面以这些单元平均量为未知数来进一步近似 (2.6.22) 中的积分

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]dt \tag{2.6.23}$$

注意到

$$\begin{aligned}
\bar{u}_{j+1}-\bar{u}_j&=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j+\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{3}{2}}}u(x,t)dx-\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}u(x,t)dx\\
&=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}[u(x+\Delta x,t)-u(x,t)]dx\\
&=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}[\Delta xu_x+\frac{\Delta x^2}{2}u_{xx}+\frac{\Delta x^3}{6}u_{xxx}+\frac{\Delta x^4}{24}u_{xxxx}+O(\Delta x^5)]dx\\
&=\frac{1}{\Delta x}\Big\{\Delta x[u_{j+\frac{1}{2}}-u_{j-\frac{1}{2}}]+\frac{\Delta x^2}{2}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}]+\\
&\quad\frac{\Delta x^3}{6}[(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j-\frac{1}{2}}]+\frac{\Delta x^4}{24}[(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_{j+\frac{1}{2}}-(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_{j-\frac{1}{2}}]+O(\Delta x^6)\Big\}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\Delta x}\Big\{\Delta x[u_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}}] + \frac{\Delta x^2}{2}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}} - (\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}] + \\
&\quad \frac{\Delta x^3}{6}[(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j+\frac{1}{2}} - (\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j-\frac{1}{2}}] + \frac{\Delta x^5}{24}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j + O(\Delta x^6)\Big\}
\end{aligned} \tag{2.6.24}
$$

类似地

$$
\begin{aligned}
\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1} = \frac{1}{\Delta x}\Big\{&\Delta x[u_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}}] - \frac{\Delta x^2}{2}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}} - (\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}] \\
&+ \frac{\Delta x^3}{6}[(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j+\frac{1}{2}} - (\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j-\frac{1}{2}}] - \frac{\Delta x^5}{24}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j + O(\Delta x^6)\Big\}
\end{aligned} \tag{2.6.25}
$$

将 (2.6.25) 式减去 (2.6.24) 式, 得

$$
\bar{u}_{j+1} - 2\bar{u}_j + \bar{u}_{j-1} = \Delta x[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}} - (\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}] + O(\Delta x^4) \tag{2.6.26}
$$

将 (2.6.26) 式代入到方程 (2.6.22) 中, 得

$$
\Delta x(\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n) = \Delta x\int_{t_n}^{t_{n+1}} F_j dt + \nu\Delta x\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\delta_x^2 \bar{u}_j}{\Delta x^2} dt + O(\Delta t\Delta x^3) \tag{2.6.27}
$$

再对方程 (2.6.27) 中的积分用矩形公式近似, 即

$$
\nu\Delta x\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\delta_x^2 \bar{u}_j}{\Delta x^2} dt = \frac{\nu\Delta t}{\Delta x}\delta_x^2 \bar{u}_j^n + O(\Delta t^2\Delta x) \tag{2.6.28}
$$

$$
\int_{t_n}^{t_{n+1}} F_j dt = \Delta t F_j^n + O(\Delta t^2) \tag{2.6.29}
$$

于是方程 (2.6.27) 成为

$$
\Delta x(\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n) = \Delta x\Delta t F_j^n + \frac{\nu\Delta t}{\Delta x}\delta_x^2 \bar{u}_j^n + O(\Delta t^2\Delta x) + O(\Delta x^3\Delta t) \tag{2.6.30}
$$

注意若函数平均值 $\bar{u}_j^n$ 用结点 (j,n) 处的 u_j^n 近似, 去掉误差项, 则可得到差分方程

$$
\Delta x(u_j^{n+1} - u_j^n) = \Delta x\Delta t F_j^n + \frac{\nu\Delta t}{\Delta x}\delta_x^2 u_j^n \tag{2.6.31}
$$

与 (2.6.15) 式相同.

§2.7 非均匀网格

对非均匀网格, 也可用 Taylor 展开方法导出差分方程. 考虑对热传导方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 在非均匀网格上近似. 首先取 $M+1$ 个结点

$$
a = x_0 < x_1 < \cdots < x_i < \cdots < x_M = b
$$

将区间 $R=(a,b)$ 分成 M 个单元:

$$R_j: x_{j-1} \leqslant x \leqslant x_j, \quad j=1,\cdots,M$$

记 $h_j = x_j - x_{j-1}$, 称 $h=\max\{h_j\}$ 为最大网格步长, 记 $x_{j-\frac{1}{2}}$ 为相邻结点 x_{j-1} 和 x_j 的中点, 即 $x_{j-\frac{1}{2}} = \dfrac{1}{2}(x_{j-1}+x_j)$ $(j=1,\cdots,M)$. 考虑下列 Taylor 展开

$$u_{j+1}^n = u_j^n + (\frac{\partial u}{\partial x})_j^n (h_{j+1}) + \frac{1}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n (h_{j+1})^2 + O(h^3) \tag{2.7.1}$$

$$u_{j-1}^n = u_j^n + (\frac{\partial u}{\partial x})_j^n (-h_j) + \frac{1}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n (-h_j)^2 + O(h^3) \tag{2.7.2}$$

两式相减, 得

$$\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{h_j + h_{j+1}} = (\frac{\partial u}{\partial x})_j^n + \frac{h_{j+1}-h_j}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n + O(h^2) \tag{2.7.3}$$

类似地, 可得

$$\begin{aligned}\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h_j} &= (\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}^n + \frac{h_j^2}{24}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_{j-\frac{1}{2}}^n + O(h^3)\\ &= (\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}^n + \frac{h_j^2}{24}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n + O(h^3)\end{aligned} \tag{2.7.4}$$

及

$$\begin{aligned}\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h_{j+1}} &= (\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}^n + \frac{h_{j+1}^2}{24}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n + O(h^3)\\ &= (\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}^n + \frac{h_{j+1}^2}{24}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n + O(h^3)\end{aligned} \tag{2.7.5}$$

式 (2.7.5) 减去 (2.7.4), 并除以 $\dfrac{h_j+h_{j+1}}{2}$, 得

$$\begin{aligned}&\frac{2}{h_j+h_{j+1}}[\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h_{j+1}} - \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h_j}]\\ =&\frac{2}{h_j+h_{j+1}}[(\frac{\partial u}{\partial x})_{j+\frac{1}{2}}^n - (\frac{\partial u}{\partial x})_{j-\frac{1}{2}}^n] + \frac{h_{j+1}-h_j}{12}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n + O(h^2)\\ =&[\frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial u}{\partial x})]_j^n + \frac{h_{j+1}-h_j}{4}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n + \frac{h_{j+1}-h_j}{12}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n + O(h^2)\\ =&(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n + \frac{h_{j+1}-h_j}{3}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n + O(h^2)\end{aligned} \tag{2.7.6}$$

对时间偏导数仍取

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = (\frac{\partial u}{\partial t})_j^n + O(\Delta t)$$

因此, 可得

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}=\frac{2}{h_j+h_{j+1}}(\frac{u_{j+1}^n-u_j^n}{h_{j+1}}-\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h_j})+R(u)$$

其中截断误差

$$R(u)=\frac{h_j-h_{j+1}}{3}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n+O(h^2)+O(\Delta t) \tag{2.7.7}$$

略去误差项, 得时间与空间均为一阶精度的差分格式

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}=\frac{2}{h_j+h_{j+1}}(\frac{u_{j+1}^n-u_j^n}{h_{j+1}}-\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h_j}) \tag{2.7.8}$$

由 $R(u)$ 的表达式知, 当取均匀网格时差分格式的精度为 $O(\Delta t+h^2)$.

§2.8 Fourier 误差分析

一个有限差分格式的误差情况可以通过 Fourier 误差分析得到. 我们知道任意周期函数都可以写成它的 Fourier 分量 e^{ikx} 的形式, 其中 k 是波数. 因此我们检验一个有限差分算子近似 e^{ikx} 导数的情况. 下面讨论一阶导数近似, 但方法可以推广到高阶.

精确的 e^{ikx} 的一阶导数是

$$\frac{de^{ikx}}{dx}=\mathrm{i}ke^{ikx} \tag{2.8.1}$$

假如对 $u_j=e^{ikx_j}$ 应用一个二阶中心差分格式, 其中 $x_j=j\Delta x$, 则

$$\begin{aligned}(\frac{\partial u}{\partial x})_j&=\frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2\Delta x}=\frac{e^{\mathrm{i}k\Delta x(j+1)}-e^{\mathrm{i}k\Delta x(j-1)}}{2\Delta x}=\frac{(e^{\mathrm{i}k\Delta x}-e^{-\mathrm{i}k\Delta x})e^{\mathrm{i}kj\Delta x}}{2\Delta x}\\&=\frac{1}{2\Delta x}[(\cos k\Delta x+\mathrm{i}\sin k\Delta x)-(\cos k\Delta x-\mathrm{i}\sin k\Delta x)]e^{\mathrm{i}kx_j}\\&=\mathrm{i}\frac{\sin k\Delta x}{\Delta x}e^{\mathrm{i}kx_j}\triangleq \mathrm{i}k^*e^{\mathrm{i}kx_j}\end{aligned} \tag{2.8.2}$$

其中 k^* 是**修正波数**, 它替代了正确波数应当出现的位置. 因此修正波数近似精确波数的程度是近似精度的一种度量. 对这里的二阶中心差分算子, 修正波数是

$$k^*=\frac{\sin k\Delta x}{\Delta x} \tag{2.8.3}$$

注意 k^* 近似 k 到二阶精度, 事实上,

$$\frac{\sin k\Delta x}{\Delta x}=k-\frac{k^3\Delta x^2}{6}+\cdots \tag{2.8.4}$$

对一阶导数的四点四阶中心差分格式 (2.5.13), 即

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j=\frac{u_{j-2}-8u_{j-1}+8u_{j+1}-u_{j+2}}{12\Delta x}+O(\Delta x^4)$$

将 $u_j = e^{ikx_j}$ 代人上式, 得

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{e^{ikx_j}(e^{-i2k\Delta x} - 8e^{-ik\Delta x} + 8e^{ik\Delta x} - e^{i2k\Delta x})}{12\Delta x}$$
$$= i\frac{e^{ikx_j}(8\sin k\Delta x - \sin 2k\Delta x)}{6\Delta x} \triangleq ik^* e^{ikx_j} \tag{2.8.5}$$

修正波数

$$k^* = \frac{8\sin k\Delta x - \sin 2k\Delta x}{6\Delta x} \tag{2.8.6}$$

同理对一阶导数的四阶 Padé 格式或紧致格式 (2.5.22) 即

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-1} + 4(\frac{\partial u}{\partial x})_j + (\frac{\partial u}{\partial x})_{j+1} = \frac{3}{\Delta x}(u_{j-1} - u_{j+1})$$

将 $(\frac{\partial u}{\partial x})_j = ik^* e^{ikx_j}$ 和 $u_j = e^{ikx_j}$ 代人上式, 可得该格式的修正波数满足

$$ik^* e^{-ik\Delta x} + 4ik^* + ik^* e^{ik\Delta x} = \frac{3}{\Delta x}(e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x})$$

于是求得修正波数

$$k^* = \frac{3\sin k\Delta x}{(2+\cos k\Delta x)\Delta x}$$

图 2.3 显式了一阶导数的精确波数及其二阶中心差分近似、四阶中心差分近似和四阶 **Padé 近似**的修正波数, 显式的修正波数的范围是 $0 \leqslant k\Delta x \leqslant \pi$.

通常, 一阶导数的有限差分算子可以写成形式

$$(\delta_x)_j = (\delta_x^a)_j + (\delta_x^s)_j$$

其中 $(\delta_x^a)_j$ 是一个反对称算子, $(\delta_x^s)_j$ 是一个对称算子, 如果我们限制网格在 $j-M$ 到 $j+M$, 则

$$(\delta_x^a)_j = \frac{1}{\Delta x}\sum_{m=1}^{M} c_m(u_{j+m} - u_{j-m})$$

和

$$(\delta_x^s)_j = \frac{1}{\Delta x}[d_0 u_j + \sum_{m=1}^{M} d_m(u_{j+m} + u_{j-m})]$$

于是可求得

$$ik^* = \frac{1}{\Delta x}[d_0 + 2\sum_{m=1}^{M} d_m\cos(mk\Delta x) + 2i\sum_{m}^{M} c_m\sin(mk\Delta x)] \tag{2.8.7}$$

显然当有限差分算子是反对称算子（例如二阶中心差分算子）时, 修正波数是纯实数, 当包括一个对称分量时, 修正波数是复数.

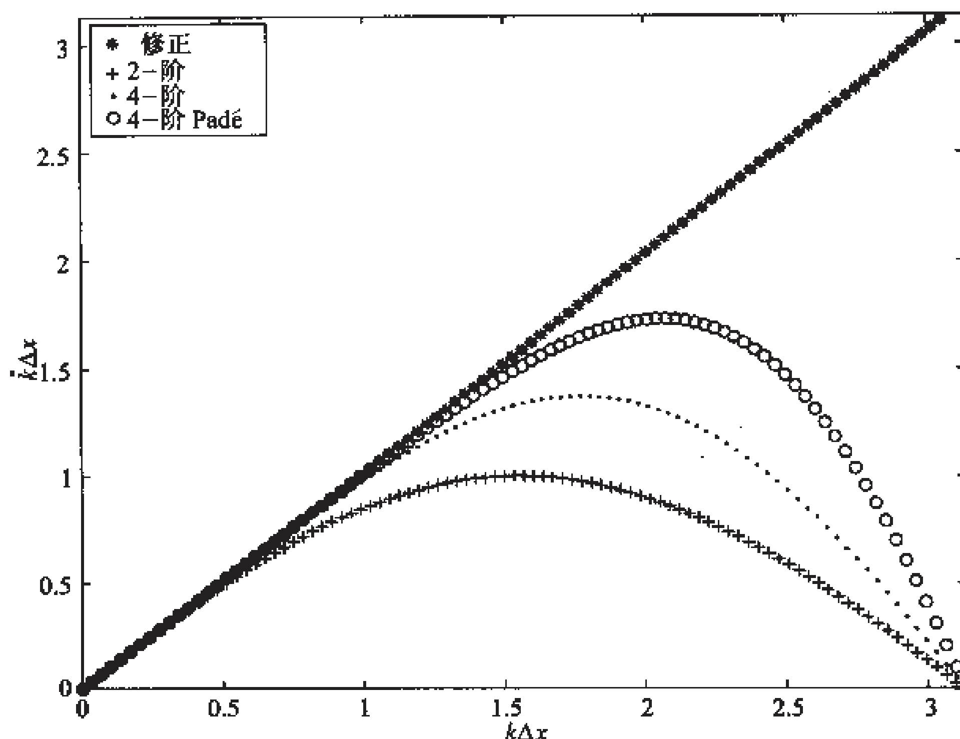


图 2.3 一阶导数三种格式的修正波数

在线性对流方程中, 误差有物理解释. 例如考虑如下形式的线性对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0,\quad -\infty<x<\infty$$

设解是波数为 k 的一个谐和函数形式

$$u(x,t)=f(t)e^{\mathrm{i}kx} \tag{2.8.8}$$

其中 $f(t)$ 满足常微分方程

$$\frac{df}{dt}=-\mathrm{i}akf \tag{2.8.9}$$

解得 $f(t)=f(0)e^{-\mathrm{i}akt}$ 再代入 (2.8.8) 式中, 得到精确解是

$$u(x,t)=f(0)e^{\mathrm{i}k(x-at)} \tag{2.8.10}$$

假如空间的一阶导数采用二阶中心差分格式, 则由前面 (2.8.2) 式可知, 这时 $f(t)$ 应满足

$$\frac{df}{dt}=-\mathrm{i}a\left(\frac{\sin k\Delta x}{\Delta x}\right)f=-\mathrm{i}ak^*f \tag{2.8.11}$$

精确求解该方程 (因为我们仅考虑来自空间近似的误差), 并代入到 (2.8.8) 式中, 得

$$u_{数值}(x,t)=f(0)e^{\mathrm{i}k(x-a^*t)} \tag{2.8.12}$$

其中 a^* 是**数值相位速度或修正相位速度**, 且与修正波数相关

$$\frac{a^*}{a}=\frac{k^*}{k}$$

对上面的例子, 有

$$\frac{a^*}{a}=\frac{\sin k\Delta x}{k\Delta x}$$

数值相位速度是谐和函数传播的速度. 因为这里 $\frac{a^*}{a}\leqslant 1$, 所以数值解比精确解传播得慢. 因为 a^* 是波数的一个函数, 所以数值近似引进了频散 (详见 §7.3), 尽管方程的精确解 (2.8.10) 式无频散. 因此一个包含很多不同波数分量的波形最终将失去它原来的形状.

图 2.4 表示了空间一阶导数的三种差分格式即二阶中心差分格式、四阶中心差分格式和四阶 Padé 格式的数值相位速度. 根据采样定理, 对一给定的波, 每波长的采样点数是 $\frac{2\pi}{k\Delta x}$. 一个格式的求解效率可以依据低于指定相位误差所要求的每波长的网格点数来描述. 例如, 二阶中心格式每波长需要 80 个采样结点才能产生小于 0.1% 的相位速度误差, 四阶中心格式和四阶 Padé 格式分别需要 15 个点和 10 个点.

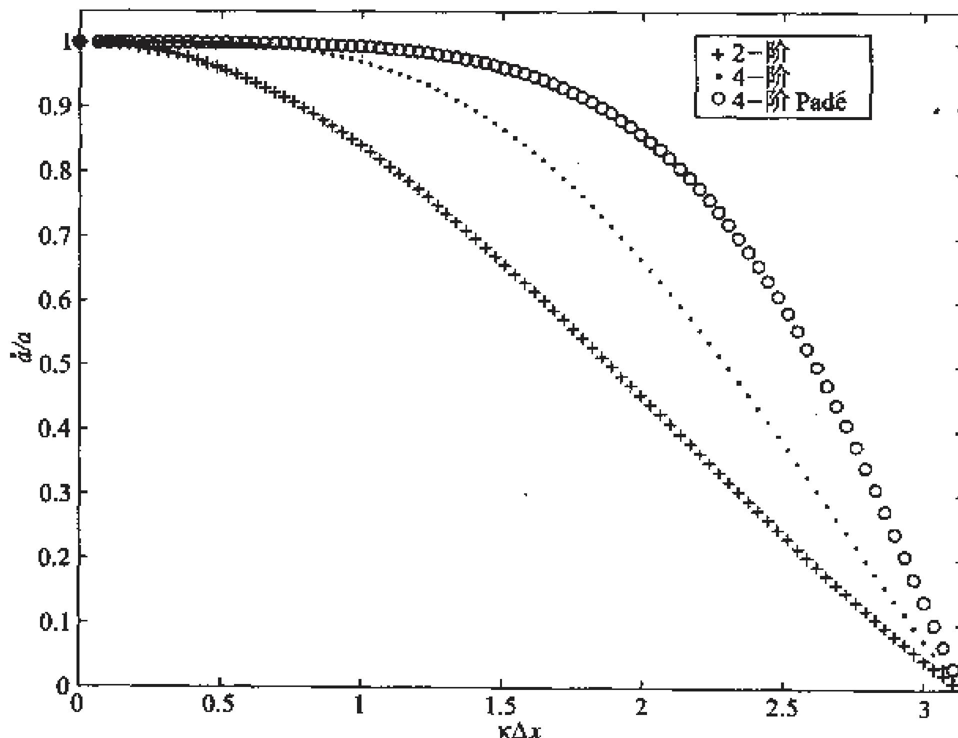


图 2.4 三种格式的数值相位速度

数值相位速度 a^* 与修正波数 k^* 有关, 修正波数一般是复数. 反对称算子如一阶导数的二阶中心差分格式, 修正波数是纯实数, 这导致相位速度误差. 对称算子的

修正波数是纯虚数, 则导致解的振幅误差. 因此, 空间差分算子的反对称部分确定相位 (速度) 误差而对称部分确定振幅误差.

练 习

1. 推导一阶导数如下形式的

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{1}{\Delta x}(au_{j-2} + bu_{j-1} + cu_j + du_{j+1})$$

的三阶精度的差分格式, 并求截断误差的主项.

2. 推导一阶导数形式为

$$a(\frac{\partial u}{\partial x})_{j-1} + (\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{1}{\Delta x}(bu_{j-1} + cu_j + du_{j+1})$$

的差分格式, 并求截断误差主项.

3. 推导二阶导数形式为

$$d(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j-1} + (\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j + e(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{j+1} = \frac{1}{\Delta x^2}(au_{j-1} + bu_j + cu_{j+1})$$

一个紧致 (Padé) 差分格式.

4. 推导三阶导数形式为

$$(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j = \frac{1}{\Delta x^3}(au_{j-2} + bu_{j-1} + cu_j + du_{j+1} + eu_{j+2})$$

的差分格式, 并求截断误差主项.

5. 对函数 e^{ikx} 作用二阶偏导数算子, 得

$$\frac{\partial^2(e^{ikx})}{\partial x^2} = -k^2 e^{ikx}$$

作用二阶差分算子, 得

$$(\delta_x^2 e^{ikj\Delta x})_j = -k^{*2} e^{ikx}$$

由此定义二阶导数近似的修正波数 k^*. 分别求二阶导数的二阶中心差分格式、非紧致四阶差分算子, 即

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j = \frac{1}{12\Delta x^2}(-u_{j-2} + 16u_{j-1} - 30u_j + 16u_{j+1} - u_{j+2}) + O(\Delta x^4)$$

和紧致四阶算子的修正波数, 并画出 $(k^*\Delta x)^2$ 随 $k\Delta x$ $(0 \leqslant k\Delta x \leqslant \pi)$ 变化的图形.

6. 推导一阶导数的 6 阶非紧致和紧致格式, 并求相位误差小于 0.1% 时每波长所需的网格点数.

7. 分别求一阶导数的一阶、二阶、三阶精度的单边差分格式

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x} \tag{2.8.13}$$

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{3u_j - 4u_{j-1} + u_{j-2}}{2\Delta x} \tag{2.8.14}$$

$$(\frac{\partial u}{\partial x})_j = \frac{11u_j - 18u_{j-1} + 9u_{j-2} - 2u_{j-3}}{16\Delta x} \tag{2.8.15}$$

的截断误差首项. 再分别推导三种格式的修正波数, 并画出 $k^*\Delta x$ 的实部和虚部随 $k\Delta x(0 \leqslant k\Delta x \leqslant \pi)$ 变化的图形.

8. 用待定系数法证明, 仅用结点 $(j\Delta x)$ 和 $(j \pm 1)\Delta x$ 可以得到 $(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j$ 的三阶或更高阶精度的近似.

第三章　有限差分格式的收敛性、相容性和稳定性

偏微分方程离散后得到的差分方程能否用来计算, 还需要考虑差分格式与方程的相容性及格式的收敛性或稳定性. 本章给出有限差分格式的收敛性、相容性和稳定性的基本概念. 判断有限差分方程解收敛到偏微方程解的最基本方法是通过相容性、稳定性和 Lax 定理来判断. Lax 定理允许我们在相容性和稳定性成立的条件下推出格式的收敛性, 而相容性和稳定性通常较容易证明. 本节的目的是通过具体的例子来说明如何判断格式的收敛性、相容性和稳定性.

§3.1 收敛性

§3.1.1 初值问题

我们首先考虑初值问题

$$\begin{cases} Lu = F \\ u(x,0) = f(x), \quad -\infty < x < +\infty \end{cases} \tag{3.1.1}$$

其中函数 u 和 F 定义在整个实轴上. 假定差分格式为

$$\begin{cases} L_j^n u_j^n = G_j^n \\ u_j^0 = f(j\Delta x), \quad j = -\infty, \cdots, \infty \end{cases} \tag{3.1.2}$$

其中 n 为时间指标, j 为空间指标, 时间步长为 Δt, 空间步长为 Δx. 首先定义差分方程 (3.1.2) 的解 u_j^n **逐点收敛**到偏微分方程 (3.1.1) 的解的概念.

定义 3.1.1 差分格式 $L_j^n u_j^n = G_j^n$ 是近似偏微分方程 $Lu = F$ 的一个逐点收敛格式, 若对任何 x 和 t, 当 $\Delta x, \Delta t \to 0$ 且 $(j\Delta x, n\Delta t) \to (x, t)$ 时, 有 $u_j^n \to u(x,t)$.

例 1 证明下列差分格式

$$u_j^{n+1} = (1-2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \tag{3.1.3}$$

$$u_j^0 = f(j\Delta x) \tag{3.1.4}$$

的解 (其中 $r = \nu\Delta t/\Delta x^2$, $0 < r \leqslant \frac{1}{2}$) 逐点收敛到初值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in \mathbf{R},\ t > 0 \tag{3.1.5}$$

$$u(x,0) = f(x), \quad x \in \mathbf{R} \tag{3.1.6}$$

证明 设 $u(x,t)$ 是初值问题 (3.1.5)~(3.1.6) 的精确解, 令

$$z_j^n = u_j^n - u(j\Delta x, n\Delta t) \tag{3.1.7}$$

由式 (2.6.15)(取 $F_j^n = 0$) 可知

$$\begin{aligned}&(\frac{\partial u}{\partial t})_j^n - \nu(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n \\ =& \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\nu}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + O(\Delta t) + O(\Delta x^2)\end{aligned} \tag{3.1.8}$$

故由方程 (3.1.5) 知, 有

$$u_j^{n+1} = (1-2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + O(\Delta t^2) + O(\Delta t \Delta x^2) \tag{3.1.9}$$

其中 $r = \dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}$. 将方程 (3.1.9) 减去 (3.1.3) 知 z_j^n 满足

$$z_j^{n+1} = (1-2r)z_j^n + r(z_{j+1}^n + z_{j-1}^n) + O(\Delta t^2) + O(\Delta t \Delta x^2) \tag{3.1.10}$$

若 $0 < r \leqslant \dfrac{1}{2}$, 则方程 (3.1.10) 中右端的系数非零, 于是

$$|z_j^{n+1}| \leqslant (1-2r)|z_j^n| + r|z_{j+1}^n| + r|z_{j-1}^n| + C(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2) \tag{3.1.11}$$

其中 C 是常数, 因为假定 u 的高阶导数 u_{tt} 和 u_{xxxx} 在 $R \times [0, t]$ 上一致有界. 对上式取 j 的上确界, 令 $Z^n = \sup\limits_j |z_j^n|$, 则得

$$Z^{n+1} \leqslant Z^n + C(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2) \tag{3.1.12}$$

应用 (3.1.12) 式, 有

$$\begin{aligned}Z^n &\leqslant Z^{n-1} + C(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2) \\ &\leqslant Z^{n-2} + 2C(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2) \\ &\cdots\cdots \\ &\leqslant Z^0 + nC(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2)\end{aligned}$$

因为 $Z^0=0$, $|u_j^n-u(j\Delta x,n\Delta t)|\leqslant Z^n$, 所以

$$|u_j^n-u(j\Delta x,n\Delta t)|\leqslant n\Delta tC(\Delta t+\Delta x^2)\to 0,\quad \Delta t,\Delta x\to 0$$

因此, 对任何 x 和 t, 当 $\Delta t,\Delta x\to 0$ 时, 且使 $(j\Delta x,n\Delta t)\to(x,t)$, 有 $u_j^n\to u(x,t)$. 所以当 $0<r\leqslant\dfrac{1}{2}$ 时, 差分格式是逐点收敛的.

□

通常逐点收敛较难证明, 且不如**一致收敛**常用. 下面给出一致收敛的概念. 在点 $(j\Delta x,n\Delta t)$ $(j=-\infty,\cdots,\infty)$ 处, 令差分方程的解向量为 $\boldsymbol{u}^n=(\cdots,u_{-1}^n,u_0^n,u_1^n,\cdots)^T$, 微分方程的解向量为 $\boldsymbol{v}^n=(\cdots,v_{-1}^n,v_0^n,v_1^n,\cdots)^T$.

定义 3.1.2 在 t 处近似偏微分方程 $Lu=F$ 的差分格式 $L_j^nu_j^n=G_j^n$ 是一个收敛格式, 若对任何 t, 当 $\Delta x,\Delta t\to 0$ 且 $n\Delta t\to t$ 时, 有

$$\|\boldsymbol{u}^n-\boldsymbol{v}^n\|\to 0 \tag{3.1.13}$$

注意在定义 3.1.2 中, 当具体讨论收敛性时, 范数必须具体指定. 另外, 注意定义 3.1.1 与定义 3.1.2 的差别. 在定义 3.1.1 中, u_j^n 收敛于 $u(x,t)$ 的速度在不同的 x 或 j 处会有很大变化. 而在定义 3.1.2 中, 若 $\boldsymbol{u}^n$ 依某范数接近于 $\boldsymbol{v}^n$, 则我们知道对所有的 j, u_j^n 一致收敛于 $u(j\Delta x,n\Delta t)$.

收敛的快慢依据**收敛阶**来衡量. 下面给出 (p,q) 收敛阶的定义.

定义 3.1.3 近似偏微分方程 $Lu=F$ 的差分格式 $L_j^nu_j^n=G_j^n$ 是一个 (p,q) 阶的收敛格式, 若对任何 t, 当 $\Delta x,\Delta t\to 0$ 且 $n\Delta t\to t$ 时,

$$\|\boldsymbol{u}^n-\boldsymbol{v}^n\|=O(\Delta x^p)+O(\Delta t^q) \tag{3.1.14}$$

也即存在常数 C, 使得

$$\|\boldsymbol{u}^n-\boldsymbol{v}^n\|\leqslant C(\Delta x^p+\Delta t^q)$$

§3.1.2 初边值问题

初边值问题差分格式的收敛性与初值问题差分格式的收敛性的差别在于空间的不同. 假如考虑 $[0,1]$ 区间上具有 Dirichlet 边界条件的差分格式

$$\begin{cases} L_j^nu_j^n=G_j^n \\ u_j^0=f(j\Delta x),\ j=0,\cdots,M \\ u_{0,0}^n \qquad\qquad n=1,2,\cdots \\ u_{M,0}^n \qquad\qquad n=1,2,\cdots \end{cases}$$

这里取 $\Delta x=\dfrac{1}{M}$. 由该格式可求得任一时间层 n 上的差分解

$$u_j^n,\quad j=1,\cdots,M-1$$

显然,这是一个有限维空间问题,空间是 $M-1$ 维的. 因为随着 Δx 减小 M 增大,所以要在合适的空间中来定义收敛性. 为此,考虑任何一个剖分序列 $\{\Delta x_j\}(j=1,2\cdots)$ 使得当 $j\to\infty$ 时, $\Delta x_j\to 0$. 令 X_j 是一个与 Δx_j 相关的范数 (记为 $\|\cdot\|_j$) 的有限维赋范空间, 则可定义如下初边值问题的收敛性.

定义 3.1.4 近似一个偏微分方程初边值问题的差分格式称为收敛的, 若对任何剖分序列 $\{\Delta x_j\}$, 当 $j\to\infty$, $\Delta t\to 0$ 且 $n\Delta t\to t$ 时, 有

$$\|\boldsymbol{u}^n-\boldsymbol{v}^n\|_j\to 0 \tag{3.1.15}$$

例 2 证明对 $0<r\leqslant\dfrac{1}{2}$, 差分格式

$$u_j^{n+1}=(1-2r)u_j^n+r(u_{j-1}^n+u_{j+1}^n),\quad n\geqslant 0 \tag{3.1.16}$$

$$u_0^{n+1}=u_M^{n+1}=0,\quad n\geqslant 0 \tag{3.1.17}$$

$$u_j^0=f(j\Delta x),\quad j=0,\cdots,M \tag{3.1.18}$$

以上确界范数收敛到初边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\quad x\in(0,1),t>0 \tag{3.1.19}$$

$$u(x,0)=f(x),\quad x\in[0,1] \tag{3.1.20}$$

$$u(0,t)=u(1,t)=0,\quad t>0 \tag{3.1.21}$$

证明 证明过程与初值问题的情况类似, 除了向量的长度是有限的且是变化的. 假定用 $\Delta x_j=\dfrac{1}{M_j}$ 的均匀网格剖分, 则有 M_j-1 个结点, 令 X_j 是 M_j-1 维向量空间, 上确界范数为

$$\|(u_1,\cdots,u_{M_j-1})^T\|_{M_j-1,\infty}=\sup_{1\leqslant j\leqslant M_j-1}|u_j| \tag{3.1.22}$$

再令

$$z_j^n=u_j^n-u(j\Delta x_j,n\Delta t) \tag{3.1.23}$$

则由前面例 1 知 z_j^n 满足

$$z_j^{n+1}=(1-2r)z_j^n+r(z_{j+1}^n+z_{j-1}^n)+O(\Delta t^2)+O(\Delta t\Delta x_j^2),\quad j=1,\cdots,M_j-1 \tag{3.1.24}$$

若 $0<r\leqslant\dfrac{1}{2}$, 则 (3.1.24) 式右端的系数非负 (注意 z_0^n 和 $z_{M_j}^n$ 为零), 于是

$$\begin{aligned}|z_j^{n+1}|&\leqslant(1-2r)|z_j^n|+r|z_{j+1}^n|+r|z_{j-1}^n|+C(\Delta t^2+\Delta t\Delta x_j^2)\\&\leqslant|z_j^n|+C(\Delta t^2+\Delta t\Delta x_j^2)\end{aligned}$$

从而

$$|z_j^n| \leqslant |z_j^0| + nC(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x_j^2)$$

注意 $z_j^0 = 0$, 对这个不等式取上确界模, 并记

$$||(z_1^n, \cdots, z_{M_j-1}^n)^T||_{M_j-1,\infty} = ||\boldsymbol{z}^n||_{M_j-1,\infty} = \sup_{1\leqslant j\leqslant M_j-1} |z_j^n|$$

得

$$||\boldsymbol{z}^n||_{M_j-1,\infty} \leqslant n\Delta t C(\Delta t + \Delta x_j^2) \tag{3.1.25}$$

其中 $\boldsymbol{z}^n = (z_1^n, \cdots, z_{M_j-1}^n)^T$. 因此, 当 $\Delta t \to 0$ 且 $n\Delta t \to t$ 及 $j \to \infty$ 时

$$||\boldsymbol{u}^n - \boldsymbol{v}^n||_{M_j-1,\infty} \to 0 \tag{3.1.26}$$

即格式收敛.

□

注意, 定义 3.1.2、3.1.3 和定义 3.1.4 很容易推广到多维情况. 例如, 对二维情况, 解向量 $\boldsymbol{u}^n = \{u_{j,k}^n\}$, 空间网格点用两个指标 j, k 来表示, 该向量也可看成一个一维向量.

§3.2 相容性

§3.2.1 初值问题

考虑偏微分方程 $Lu = F$ 与其相应的差分近似 $L_j^n u_j^n = G_j^n$ 之间的相容性. 首先给出**逐点相容**的定义.

定义 3.2.1 *差分格式 $L_j^n u_j^n = G_j^n$ 与微分方程 $Lu = F$ 在点 (x,t) 处是逐点相容的, 若对任何光滑函数 $\phi = \phi(x,t)$, 当 $\Delta x, \Delta t \to 0$ 且 $(j\Delta x, n\Delta t) \to (x,t)$ 时,*

$$(L\phi - F)_j^n - [L_j^n \phi(j\Delta x, n) - G_j^n] \to 0 \tag{3.2.1}$$

特别地, 在 (3.2.1) 式中, 若选择 ϕ 是偏微方程的解 $u(x,t)$, 则 (3.2.1) 式变为

$$L_j^n u_j^n - G_j^n \to 0, \quad \Delta x, \Delta t \to 0 \tag{3.2.2}$$

式 (3.2.2) 常用来检验格式的逐点相容性, 下面给出一个更强的相容性定义, 即**模相容**的定义. 假如可以将两层格式写成

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n + \Delta t \boldsymbol{G}^n \tag{3.2.3}$$

其中

$$\boldsymbol{u}^n = (\cdots, u_{-1}^n, u_0^n, u_1^n, \cdots)^T$$
$$\boldsymbol{G}^n = (\cdots, G_{-1}^n, G_0^n, G_1^n, \cdots)^T$$

其中 Q 是一个作用在适当空间上的一个算子.

定义 3.2.2 差分格式 (3.2.3) 与偏微分方程关于 $\|\cdot\|$ 是相容的, 假如偏微分方程的解 v 满足

$$v^{n+1} = Qv^n + \Delta t G^n + \Delta t \boldsymbol{\tau}^n \tag{3.2.4}$$

及当 $\Delta x, \Delta t \to 0$ 时

$$\|\boldsymbol{\tau}^n\| \to 0 \tag{3.2.5}$$

其中 v^n 表示该向量的第 j 个分量是 $v(j\Delta x, n\Delta t)$.

模相容性是使向量 $\boldsymbol{\tau}^n$ 的所有分量以一种一致的方式收敛到零. 假如逐点相容性用于 (3.2.2) 式, 则等价于当 $\Delta x, \Delta t \to 0$ 时, $\tau_j^n \to 0$. 因此, 两种定义的差别在于 $\boldsymbol{\tau}^n$ 收敛到零是分量方式还是向量方式. 差分格式的阶是根据 $\boldsymbol{\tau}^n$ 趋于零的阶来定义的.

定义 3.2.3 差分格式 (3.2.3) 是 (p,q) 阶精度, 假如

$$\|\boldsymbol{\tau}^n\| = O(\Delta x^p) + O(\Delta t^q) \tag{3.2.6}$$

其中称 $\boldsymbol{\tau}^n$ 或 $\|\boldsymbol{\tau}^n\|$ 称为截断误差.

容易看到, 假如格式是 $(p,q)(p,q \geqslant 1)$ 阶的, 则它是一个相容的格式, 另外, 假如一个格式是 (模) 相容或 (p,q) 阶的, 则该格式是逐点相容的.

例 1 讨论显式格式

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \tag{3.2.7}$$

与偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad -\infty < x < \infty \tag{3.2.8}$$

的相容性.

解 为证明相容性将 (3.2.7) 式写成 (3.2.3) 式的形式, 即

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \tag{3.2.9}$$

其中 $r = v\dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}$. 根据定义 3.2.2, 令 v 是偏微分方程 (3.2.8) 的解, 则

$$\begin{aligned}
\Delta t \tau_j^n &= v_j^{n+1} - [v_j^n + r(v_{j+1}^n - 2v_{j+1}^n + v_{j-1}^n)] \\
&= v_j^n + (\frac{\partial v}{\partial t})_t^n \Delta t + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(j\Delta x, t_1)\frac{\Delta t^2}{2} \\
&\quad -\Big\{v_j^n + r[v_j^n + (\frac{\partial v}{\partial x})_j^n \Delta x + (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_j^n \frac{\Delta x^2}{2} + (\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_j^n \frac{\Delta x^3}{6} + \frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_1, n\Delta t)\frac{\Delta x^4}{24} \\
&\quad -2v_j^n + v_j^n - (\frac{\partial v}{\partial x})_j^n \Delta x + (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_j^n \frac{\Delta x^2}{2} - (\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_j^n \frac{\Delta x^3}{6} + \frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_2, n\Delta t)\frac{\Delta x^4}{24}\Big\}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= (\frac{\partial v}{\partial t})_j^n \Delta t - r\Delta x^2 (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_j^n + \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(j\Delta x, t_1)\frac{\Delta t^2}{2} \\
&\quad - r\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_1, n\Delta t)\frac{\Delta x^4}{24} - r\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_2, n\Delta t)\frac{\Delta x^4}{24} \\
&= (\frac{\partial v}{\partial t} - \nu\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_j^n \Delta t + \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(j\Delta x, t_1)\frac{\Delta t^2}{2} \\
&\quad - \nu\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_1, n\Delta t)\frac{\Delta x^2}{24}\Delta t - \nu\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_2, n\Delta t)\frac{\Delta x^2}{24}\Delta t
\end{aligned}
\tag{3.2.10}
$$

其中 t, x_1, x_2 是 Taylor 级数余项中的适当的点. 由于 $v_t - \nu v_{xx} = 0$, 所以

$$
\tau_j^n = \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(j\Delta x, t_1)\frac{\Delta t}{2} - \nu\Big[\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_1, n\Delta t) + \frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_2, n\Delta t)\Big]\frac{\Delta x^2}{24} \tag{3.2.11}
$$

假定 $\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}$ 和 $\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}$ 在 $R \times [0, t_0](t_0 > t)$ 上一致有界, 则差分格式在上确界模即

$$
\|\boldsymbol{u}\|_\infty = \|(\cdots, u_{-1}, u_0, u_1, \cdots)^T\|_\infty = \sup_{-\infty<j<\infty} |u_j| \tag{3.2.12}
$$

的意义下, 是 (2,1) 阶精度的, 从而也相容.

假如 $\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}$ 和 $\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}$ 对任何 Δx 和 Δt 满足

$$
\sum_{j=-\infty}^{\infty} \Big[(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_j^n\Big]^2 < C_1 < \infty
$$

及

$$
\sum_{j=-\infty}^{\infty} \Big[(\frac{\partial^4 v}{\partial x^4})_j^n\Big]^2 < C_2 < \infty
$$

其中 C_1、C_2 为某常数, 则差分格式关于 l_2 模即

$$
\|\boldsymbol{u}\|_{l_2} = \|(\cdots, u_{-1}, u_0, u_1, \cdots)^T\|_{l_2} = \Big\{\sum_{j=-\infty}^{\infty} |u_j|^2\Big\}^{\frac{1}{2}} \tag{3.2.13}
$$

是 (2,1) 阶精度, 从而也相容.

□

例 2 讨论差分格式

$$
L_j^n u_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\nu}{\Delta x^2}\delta_x^2 u_j^{n+1} = F_j^{n+1} \tag{3.2.14}
$$

与偏微分方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F$ 的相容性. 其中 δ_x^2 是关于 x 的二阶中心差分算子, $F_j^{n+1} = F(j\Delta x, (n+1)\Delta t)$.

解 假定 v 是偏微分方程的解, 进行下面的展开

$$\begin{aligned}
L_j^n v_j^n - F_j^{n+1} &= \frac{v_j^{n+1} - v_j^n}{\Delta t} - \frac{\nu}{\Delta x}\,(v_{j+1}^{n+1} - 2v_j^{n+1} + v_{j-1}^{n+1}) - F_j^{n+1} \\
&= \frac{1}{\Delta t}[v_j^{n+1} - v_j^{n+1} - (\frac{\partial v}{\partial t})_j^{n+1}(-\Delta t) - (\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_j^{n+1}\frac{(-\Delta t)^2}{2!} - \cdots] \\
&\quad - \frac{\nu}{\Delta x^2}[v_j^{n+1} + (\frac{\partial v}{\partial x})_j^{n+1}\Delta x + (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_j^{n+1}\frac{(\Delta x)^2}{2!} \\
&\quad + (\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_j^{n+1}\frac{\Delta x^3}{3!} + (\frac{\partial^4 v}{\partial x^4})_j^{n+1}\frac{\Delta x^4}{4!} + \cdots - 2v_j^{n+1} + v_j^{n+1} \\
&\quad + (\frac{\partial v}{\partial x})_j^{n+1}(-\Delta x) + (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_j^{n+1}\frac{(-\Delta x)^2}{2!} \\
&\quad + (\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_j^{n+1}\frac{(-\Delta x)^3}{3!} + (\frac{\partial^4 v}{\partial x^4})_j^{n+1}\frac{(-\Delta x)^4}{4!} + \cdots] - F_j^{n+1} \\
&= (\frac{\partial v}{\partial x})_j^{n+1} - \frac{\Delta t}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_j^{n+1} + \cdots - \nu(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_j^{n+1} - 2\nu(\frac{\partial^4 v}{\partial x^4})\frac{\Delta x^2}{4!} + \cdots - F_j^{n+1} \\
&= -\frac{\Delta t}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_j^{n+1} - 2\nu(\frac{\partial^4 v}{\partial x^4})_j^{n+1}\frac{\Delta x^2}{4!} + \cdots \\
&= O(\Delta t) + O(\Delta x^2)
\end{aligned} \tag{3.2.15}$$

因此, 假定 $\dfrac{\partial^2 v}{\partial t^2}$ 和 $\dfrac{\partial^4 v}{\partial x^4}$ 在点 (x,t) 附近存在和有界, 由逐点相容性定义知隐式格式 (3.2.14) 是逐点相容的.

为了解格式是否模相容, 将 (3.2.14) 式写成下列形式

$$Q_1 \boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n + \Delta t \boldsymbol{F}^{n+1} \tag{3.2.16}$$

其中 $Q_1 = \mathrm{diag}(-r, 1+2r, -r)$, $Q = I$ 是单位矩阵, $r = \dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}$. 再将 (3.2.15) 式写成

$$Q_1 \boldsymbol{v}^{n+1} = Q\boldsymbol{v}^n + \Delta t \boldsymbol{F}^{n+1} + \Delta t \tilde{\boldsymbol{\tau}}^n \tag{3.2.17}$$

其中 $\tilde{\boldsymbol{\tau}}^n$ 是 (3.2.15) 中的误差. 由

$$\boldsymbol{v}^{n+1} = Q_1^{-1}Q\boldsymbol{v}^n + \Delta t Q_1^{-1}\boldsymbol{F}^{n+1} + \Delta t Q_1^{-1}\tilde{\boldsymbol{\tau}}^n \tag{3.2.18}$$

于是根据定义 3.2.2 或 3.2.3, 有

$$\|\boldsymbol{\tau}^n\| = \|Q_1^{-1}\tilde{\boldsymbol{\tau}}^n\| \leqslant \|Q_1^{-1}\|\ \|\tilde{\boldsymbol{\tau}}^n\| \tag{3.2.19}$$

假如当 $\Delta x, \Delta t \to 0$ 时, $\|Q_1^{-1}\|$ 一致有界, 则格式关于 $\|\cdot\|$ 的相容性由 $\tilde{\boldsymbol{\tau}}^n$ 确定.

因此, 假定偏微分方程适当的导数有界, 则差分格式 (3.2.14) 关于上确界范数精确到 (2, 1) 阶.

假如对任何 Δx 和 Δt, 导数 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ 和 $\dfrac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ 满足

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty}\left[(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2})_j^n\right]^2 < C_1 < \infty$$

及

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty}\left[(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4})_j^n\right]^2 < C_1 < \infty$$

其中 C_1、C_2 为某正常数, 则差分格式 (3.2.14) 关于 l_2 模相容 (只要 Q_1^{-1} 关于 l_2 模有界).

□

例 3 验证方程 $\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0$ 在 $(j\Delta x, n\Delta t)$ 的差分格式

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\Delta t}-\frac{u_{j+1}^n-2[\theta u_j^{n+1}+(1-\theta)u_j^{n-1}]+u_{j-1}^n}{\Delta x^2}=0 \tag{3.2.20}$$

在 $(j\Delta x, n\Delta t)$ 处的局部截断误差为

$$\frac{\Delta t^2}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}-\frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+(2\theta-1)\frac{2\Delta t}{\Delta x^2}\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}+O(\frac{\Delta t^3}{\Delta x^2}+\Delta t^4+\Delta x^4) \tag{3.2.21}$$

讨论 (1)$\Delta t = r\Delta x$, (2)$\Delta t = r\Delta x^2$ 两种情况下差分格式与方程的相容性. 其中 r 是一个正常数, θ 是一个变数.

解 将 $u_j^{n+1}, u_j^{n-1}, u_{j+1}^n, u_{j-1}^n$ 在点 $(j\Delta x, n\Delta t)$ 处展成泰勒级数

$$u_{j+1}^n = u_j^n+\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j^n+\frac{\Delta x^2}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n+\frac{\Delta x^3}{6}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n+\cdots$$

$$u_{j-1}^n = u_j^n-\Delta x(\frac{\partial u}{\partial x})_j^n+\frac{\Delta x^2}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n-\frac{\Delta x^3}{6}(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3})_j^n+\cdots$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n+\Delta t(\frac{\partial u}{\partial t})_j^n+\frac{\Delta t^2}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2})_j^n+\frac{\Delta t^3}{6}(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3})_j^n+\cdots$$

$$u_j^{n-1} = u_j^n-\Delta t(\frac{\partial u}{\partial t})_j^n+\frac{\Delta t^2}{2}(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2})_j^n-\frac{\Delta t^3}{6}(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3})_j^n+\cdots$$

将上面四式代入 (3.2.20) 式, 可得局部截断误差 R_j^n 为

$$\begin{aligned}R_j^n = (\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_j^n+\Bigg[&\frac{\Delta t^2}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}-\frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+(2\theta-1)\frac{2\Delta t}{\Delta x^2}\frac{\partial u}{\partial t}\\&+\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}+O(\frac{\Delta t^3}{\Delta x^2}+\Delta t^4+\Delta x^4)\Bigg]\end{aligned} \tag{3.2.22}$$

由于 $\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0$, 即截断误差 (3.2.21) 式. 下面考虑相容性.

(1) $\Delta t = r\Delta x$.

当 $\Delta t, \Delta x \to 0$ 时, 局部截断误差 R_j^n 为

$$R_j^n \to [\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+(2\theta-1)\frac{2r}{\Delta x}\frac{\partial u}{\partial t}+r^2\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}]_j^n$$

当 $\theta \neq \frac{1}{2}$ 时, 第三项趋于无穷, 当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时, R_j^n 为

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + r^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

在这种情况下, 有限差分方程与下列双曲型方程相容

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + r^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$

因此, 当 $\Delta t = r\Delta x$ 时, 有限差分格式不与 $\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$ 相容.

(2) $\Delta t = r\Delta x^2$.

当 $\Delta t, \Delta x \to 0$ 时, 局部截断误差 R_j^n 为

$$R_j^n \to [\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2(2\theta - 1)r\frac{\partial u}{\partial t}]_j^n$$

当 $\theta \neq \frac{1}{2}$ 时, 差分格式与下面抛物型方程

$$[1 + 2(2\theta - 1)r]\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

相容. 因此当 $\Delta t = r\Delta x^2$ 并且当且仅当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时, 差分格式与给定的微分方程相容.

□

§3.2.2 初边值问题

初边值问题的逐点相容性与初值问题的逐点相容性一样, 除了要考虑边界条件的近似. 初边值问题的模相容性要在有限维空间序列 X_j 中考虑范数 $\|\cdot\|_j$. 定义也类似, 只要将定义 3.2.2 和 3.2.3 中的范数 $\|\cdot\|$ 换成范数序列 $\|\cdot\|_j$ 即可.

例 4 讨论差分格式

$$u_j^{n+1} = (1 - 2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad j = 1, \cdots, M - 1 \tag{3.2.23}$$

$$u_M^{n+1} = 0 \tag{3.2.24}$$

$$u_0^{n+1} = (1 - 2r)u_0^n + 2ru_1^n \tag{3.2.25}$$

与初边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0, 1), \ t > 0 \tag{3.2.26}$$

$$u(1, t) = 0, \quad t > 0 \tag{3.2.27}$$

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \tag{3.2.28}$$

的相容性, 其中 $r = \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}$.

解 由前面我们知道，差分格式 (3.2.23) 是一个 $O(\Delta t)+O(\Delta x)$ 精度格式，而 (3.2.25) 式是一个 $O(\Delta x^2)$ 精度的格式. 因此差分格式 (3.2.23)~(3.2.25) 对方程 (3.2.26)~(3.2.28) 是一个 $O(\Delta t)+O(\Delta x^2)$ 的逐点相容近似.

现考虑模相容性. 将差分格式 (3.2.23)~(3.2.25) 写成

$$\boldsymbol{u}^{n+1}=Q\boldsymbol{u}^n \tag{3.2.29}$$

其中 $\boldsymbol{u}^n=(u_0^n,\cdots,u_{M-1}^n)^T$,

$$Q=\begin{bmatrix}1-2r & r & & & \\ r & 1-2r & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r & 1-2r & r\end{bmatrix}_{(M-1)\times(M-1)}$$

显然，现在考虑的空间是 $M-1$ 维. 设 $\boldsymbol{v}$ 是初边值问题 (3.2.26)~(3.2.28) 的解，则相应有

$$\boldsymbol{v}^{n+1}=Q\boldsymbol{v}^n+\Delta t\boldsymbol{\tau}^n \tag{3.2.30}$$

将 (3.2.29) 式写成下面的矩阵形式我们已经知道当 $j=1,\cdots,M-1$ 时, τ_j^n 是 $O(\Delta t)+O(\Delta x^2)$ 量. 下面考虑 $j=0$ 时的情况, 由式 (3.2.30) 得

$$\begin{aligned}\Delta t\tau_0^n&=v_0^{n+1}-(1-2r)v_0^n-2rv_1^n\\ &=v_0^n+(\frac{\partial v}{\partial t})_0^n\Delta t+(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_0^n\frac{\Delta t^2}{2}+\cdots\\ &\quad-\{(1-2r)v_0^n+2r[v_0^n+(\frac{\partial v}{\partial x})_0^n\Delta x+(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_0^n\frac{\Delta x^2}{2}+(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_0^n\frac{\Delta x^3}{6}+\cdots\}\\ &=[(\frac{\partial v}{\partial x})_0^n-\nu(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_0^n]\Delta t-2r\Delta x(\frac{\partial v}{\partial x})_0^n+(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_0^n\frac{\Delta t^2}{2}-\frac{\nu\Delta x\Delta t}{3}(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_0^n+\cdots\end{aligned}$$

利用 $(\frac{\partial v}{\partial x})_0^n=0$ 和 $(\frac{\partial v}{\partial t})_0^n=(\nu\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_0^n=0$, 得

$$\tau_0^n=\frac{\Delta t}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_0^n-\frac{\nu\Delta x}{3}(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_0^n+\cdots \tag{3.2.31}$$

尽管对点 $j=1,\cdots,M-1$, 差分格式是 $O(\Delta t)+O(\Delta x^2)$ 阶精度, 但在 $j=0$ 点处, 仅是 $O(\Delta t)+O(\Delta x)$ 阶精度. 因此, 差分格式 (3.2.23)~(3.2.25) 关于上确界模或 l_2 模是相容的, 且精确到 $O(\Delta t)+O(\Delta x)$.

例 5 讨论差分格式

$$u_j^{n+1}=(1-2r)u_j^n+r(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n),\quad j=1,\cdots,M-1 \tag{3.2.32}$$

$$u_M^{n+1}=0 \tag{3.2.33}$$

$$u_0^n=u_1^n \tag{3.2.34}$$

与初边值问题 (3.2.26)~(3.2.28) 的相容性, 其中 $r = \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}$.

解 由前面可知, (3.2.32) 式对方程 (3.2.26) 是一个 $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$ 阶近似, 而 (3.2.34) 式对边界条件 (3.2.28) 是一个 $O(\Delta x)$ 阶近似, 因此差分格式 (3.2.32)~(3.2.34) 是对初边值问题 (3.2.26)~(3.2.28) 的一个 $O(\Delta t) + O(\Delta x)$ 阶逐点相容近似.

下面考虑模相容性, 将差分方程写成

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n \tag{3.2.35}$$

其中 $\boldsymbol{u}^n = (u_1^n, \cdots, u_{M-1}^n)^T$,

$$Q = \begin{bmatrix} 1-2r & r & & & \\ r & 1-2r & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r & 1-2r & r \\ & & & r & 1-2r \end{bmatrix}$$

如 $\boldsymbol{u}$ 取偏微分方程的解 v, 则 (3.2.35) 式成为

$$\boldsymbol{v}^{n+1} = Q\boldsymbol{v}^n + \Delta t\boldsymbol{\tau}^n \tag{3.2.36}$$

与上例不同的是, 现在考虑的空间是 $M-1$ 维空间. 易知, 结合边界条件后, 当 $j = 2, \cdots, M-1$ 时,(3.2.32) 式是 $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$ 阶精度, 当 $j = 1$ 时,

$$u_1^{n+1} = (1-2r)u_1^n + r(u_2^n + u_0^n) = (1-r)u_1^n + ru_2^n \tag{3.2.37}$$

下面计算 $\Delta t\tau_1^n$.

$$\begin{aligned}
\Delta t\tau_1^n &= v_1^{n+1} - \{(1-r)v_1^n + rv_2^n\} \\
&= [v_1^n + (\frac{\partial v}{\partial t})_1^n\Delta t + (\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_1^n\frac{\Delta t^2}{2} + \cdots] \\
&\quad -\{(1-r)v_1^n + r\{v_1^n + (\frac{\partial v}{\partial x})_1^n\Delta x + (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n\frac{\Delta x^2}{2} + (\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_1^n\frac{\Delta x^3}{6} + \cdots\} \\
&= (\frac{\partial v}{\partial t})_1^n\Delta t - r\Delta x(\frac{\partial v}{\partial x})_1^n - r\frac{\Delta x^2}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n + \frac{\Delta t^2}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_1^n - r\frac{\Delta x^3}{6}(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_1^n + \cdots
\end{aligned} \tag{3.2.38}$$

因为

$$0 = (\frac{\partial v}{\partial x})_0^n = (\frac{\partial v}{\partial x})_1^n + (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n(-\Delta x) + (\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_1^n\frac{(-\Delta x)^2}{2} + \cdots$$

所以

$$(\frac{\partial v}{\partial x})_1^n = \Delta x(\frac{\partial v}{\partial x})_1^n - \frac{\Delta x^2}{2}(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_1^n + \cdots$$

将上式代入 (3.2.37) 式得

$$\begin{aligned}\Delta t\tau_1^n &= (\frac{\partial v}{\partial t})_1^n\Delta t - r\Delta x[\Delta x(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n - \frac{\Delta x^2}{2}(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_1^n + \cdots] \\ &\quad -r\frac{\Delta x^2}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n + \frac{\Delta t^2}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2})_1^n - r\frac{\Delta x^3}{6}(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3})_1^n + \cdots \\ &= (\frac{\partial v}{\partial t} - \nu\frac{3}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n\Delta t + O(\Delta t\Delta x) + O(\Delta t^2) \\ &= -\frac{\nu}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n\Delta t + O(\Delta t\Delta x) + O(\Delta t^2)\end{aligned}$$

因为 $\frac{\partial v}{\partial t} - \nu\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0$, 所以

$$\tau_1^n = -\frac{\nu}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2})_1^n + O(\Delta x) + O(\Delta t) \tag{3.2.39}$$

根据定义 3.2.2, 差分格式 (3.2.32)~(3.2.34) 与偏微分方程 (3.2.26)~(3.2.28) 不相容.

□

对不相容的格式, 我们不能根据后面的 Lax 定理来证明格式的收敛性, 然而该格式是收敛的.

如同在初值问题中一样, 下面再给出一例, 说明 (初) 边值问题隐式格式的相容性比显式格式困难.

例 6 考虑差分格式

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\nu}{\Delta x^2}\delta_x^2 u_j^{n+1} \tag{3.2.40}$$

$$u_0^{n+1} = u_M^{n+1} = 0 \tag{3.2.41}$$

与边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0,1),\ t > 0 \tag{3.2.42}$$

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad t > 0 \tag{3.2.43}$$

的相容性.

解 将差分格式写成矩阵形式

$$Q_1\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n \tag{3.2.44}$$

其中 Q 是单位矩阵,

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 1+2r & -r & & & \\ -r & 1+2r & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -r & 1+2r & -r \\ & & & -r & 1+2r \end{bmatrix}_{(M-1)\times(M-1)}$$

且 $r = \dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}$. 逐点相容性如本节例 2 分析一样. 假若 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ 和 $\dfrac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ 有界, 差分格式与方程逐点相容. 关于模相容性, 由例 2 中的 (3.2.19) 式, 有

$$||\tau^n|| \leqslant ||Q_1^{-1}||\ ||\bar{\tau}^n||$$

其中 $\bar{\tau}^n = O(\Delta t)+O(\Delta x^2)$. 因此只要 $||Q_1^{-1}||$ 一致有界, 当 $\Delta t, \Delta x \to 0$, 有 $||\tau^n|| \to 0$. 从而格式模相容. 其中模或为上确界模, 或为 l_2 模, 这依赖于对 u 的导数的假定.

首先证明 Q_1^{-1} 的上确界模 $||Q_1^{-1}||_\infty$ 有界. 因为

$$Q_1\alpha_j = -r\alpha_{j-1} + (1+2r)\alpha_j - r\alpha_{j+1} \triangleq \beta_j$$

利用

$$||\alpha_j||_\infty = ||\alpha_{j\pm1}||_\infty$$

也即对序列 α_j 的指标变换成 +1 或 −1, 其上确界模仍相等, 所以

$$\begin{aligned} ||Q_1\alpha_j||_\infty &= ||-r\alpha_{j-1} + (1+2r)\alpha_j - r\alpha_{j+1}||_\infty \\ &\geqslant (1+2r)||\alpha_j||_\infty - 2r||\alpha_j||_\infty \\ &= ||\alpha_j||_\infty \end{aligned}$$

因此 $||Q_1^{-1}||_\infty$ 有界.

其次证明 $||Q_1^{-1}||_{l_2}$ 有界. 因为 $||Q_1^{-1}||_{l_2} = \dfrac{1}{|\lambda_{\min}|}$, 其中 $\lambda_{\min}$ 是 Q_1 的最小特征值, 又 Q_1 的特征值为

$$\lambda = 1 + 2r - 2r\cos\frac{j\pi}{M} = 1 + 4r\sin^2\frac{j\pi}{2M}, \quad j = 1, \cdots, M-1$$

所以

$$||Q_1^{-1}||_{l_2} = \frac{1}{\lambda_{\min}} = \frac{1}{\min\{1 + 4\pi\sin^2\dfrac{j\pi}{2M}\}} \leqslant 1$$

因此 $||Q_1^{-1}||_{l_2}$ 有界.

□

§3.3 稳定性

上面讨论了相容性和收敛性, 现在讨论稳定性. 如在相容性讨论中所看到, 大多数格式是相容的. 证明收敛性的主要目标是要得到稳定性.

对如下形式的两层格式

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n, \quad n \geqslant 0,\ (n+1)\Delta t \leqslant T \tag{3.3.1}$$

定义关于初值的稳定性.

定义 3.3.1 差分格式 (3.3.1) 称为关于 $\|\cdot\|$ 是稳定的, 假定存在正常数 Δx_0 和 Δt_0, 以及非负常数 K, 使得

$$\|\boldsymbol{u}^{n+1}\| \leqslant K\|\boldsymbol{u}^0\| \tag{3.3.2}$$

对 $0 < \Delta x \leqslant \Delta x_0$ 及 $0 < \Delta t \leqslant \Delta t_0$ 成立.

注意这是稳定性的一种较强的定义, 蕴含差分方程的解必须是有界的, 有无限制 $(n+1)\Delta t \leqslant T$ 均可, 然而, 方程的解可以随着时间 (不是时间步数) 增长, 当无限制条件 $(n+1)\Delta t \leqslant T$ 时, (3.3.2) 式可用下式代替

$$\|\boldsymbol{u}^{n+1}\| \leqslant Ke^{\beta t}\|\boldsymbol{u}^0\| \tag{3.3.3}$$

其中 β 是非负数. 显然 (3.3.3) 式与限制条件 $0 < (n+1)\Delta t \leqslant T$ 蕴含不等式 (3.3.2) 式.

命题 3.3.1 差分格式 (3.3.1) 关于模 $\|\cdot\|$ 是稳定的当且仅当存在正常数 Δx_0 和 Δt_0 以及非负常数 K 使得

$$\|Q^{n+1}\| \leqslant K \tag{3.3.4}$$

对 $0 < \Delta x \leqslant \Delta x_0, 0 < \Delta t \leqslant t_0$ 成立.

证明 因为

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n = Q(Q\boldsymbol{u}^{n-1}) = Q^2\boldsymbol{u}^{n-1} = \cdots = Q^{n+1}\boldsymbol{u}^0 \tag{3.3.5}$$

所以

$$\|\boldsymbol{u}^{n+1}\| = \|Q^{n+1}\boldsymbol{u}^0\| \leqslant K\|\boldsymbol{u}^0\|$$

或

$$\frac{\|Q^{n+1}\boldsymbol{u}^0\|}{\|\boldsymbol{u}^0\|} \leqslant K$$

充分性 对所有非零向量 $\|\boldsymbol{u}^0\|$ 在两边取上确界, 得

$$\|Q^{n+1}\| \leqslant K \tag{3.3.6}$$

必要性

$$||Q^{n+1}\boldsymbol{u}^0|| \leqslant ||Q^{n+1}||\ ||\boldsymbol{u}^0||$$

和不等式 (3.3.4) 蕴含不等式 (3.3.2) (即稳定性).

□

注意, 同样 (3.3.4) 式蕴含限制条件 $(n+1)\Delta t \leqslant T$. 更一般地, 若无限制条件 $(n+1)\Delta t \leqslant T$, 则 (3.3.4) 式可由下式代替

$$||Q^{n+1}\boldsymbol{u}^0|| \leqslant Ke^{\beta t}$$

其中 β 为非负常数. 不失一般性, 下面的讨论均假定有条件 $(n+1)\Delta t \leqslant T$($T$ 为某常数) 及偏微分方程问题本身的解有界.

例 1 证明差分格式

$$u_j^{n+1} = (1-2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \tag{3.3.7}$$

关于上确界范数是稳定的. 其中 $r = \dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}$($\nu$ 为常数).

解 注意当 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 时, (3.3.7) 式右端各项系数为正, 所以

$$|u_j^{n+1}| \leqslant (1-2r)|u_j^n| + r|u_{j+1}^n| + r|u_{j-1}^n| \leqslant ||\boldsymbol{u}^n||_\infty$$

在两边关于 j 取上确界范数, 得到

$$||\boldsymbol{u}^{n+1}||_\infty \leqslant ||\boldsymbol{u}^n||_\infty$$

根据稳定性定义 3.3.1, 格式稳定.

□

格式 (3.3.7) 的稳定性要求是 $r = \dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2} \leqslant \dfrac{1}{2}$, 在这种情况下, 称它为**条件稳定**, 如果稳定性对 Δt 和 Δx 无任何限制, 则称格式**绝对稳定**或**无条件稳定**.

例 2 讨论 FTFS 差分格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - a\frac{\Delta t}{\Delta x}(u_{j+1}^n - u_j^n), \quad a < 0 \tag{3.3.8}$$

的稳定性.

解 该格式是抛物型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad a < 0 \tag{3.3.9}$$

关于上确界模和 l_2 模的一个相容格式.

将差分格式 (3.3.8) 改写成

$$u_j^{n+1} = (1+r)u_j^n - ru_{j+1}^n \tag{3.3.10}$$

其中 $r=\dfrac{a\Delta t}{\Delta x}$. 注意到

$$\begin{aligned}\sum_{j=-\infty}^{\infty}|u_j^{n+1}|^2 &= \sum_{j=-\infty}^{\infty}|(1+r)u_j^n - ru_{j+1}^n|^2\\ &\leqslant \sum_{j=-\infty}^{\infty}\{|1+r|^2|u_j^n|^2+2|1+r|\ |r|\ |u_j^n|\ |u_{j+1}^n|+|r|^2|u_{j+1}^n|^2\}\\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty}(|1+r|^2+2|1+r|\ |r|+|r|^2)|u_j^n|^2\\ &= (|1+r|+|r|)^2\sum_{j=-\infty}^{\infty}|u_j^n|^2\end{aligned}$$

该式可写成 l_2 模的形式

$$||\boldsymbol{u}^{n+1}||_{l_2}\leqslant K_1||\boldsymbol{u}^n||_{l_2} \tag{3.3.11}$$

其中 $K_1=|1+r|+|r|$. 重复该过程 n 次, 得

$$||\boldsymbol{u}^{n+1}||_{l_2}\leqslant K_1^{n+1}||\boldsymbol{u}^0||_{l_2} \tag{3.3.12}$$

将该不等式与不等式 (3.3.2)($\beta=0$ 的 (3.3.3) 式) 比较, 必须求一个非负常数 K, 使得

$$(|1+r|+|r|)^{n+1}\leqslant K \tag{3.3.13}$$

这一点只要限制 $|1+r|+|r|\leqslant 1$ 即可满足, 于是取 $K=1$, 因为 $r=a\dfrac{\Delta t}{\Delta x}<0$. 不难得到, 这要求 $|1+r|\leqslant 1+r$, 即 $-1\leqslant r<0$.

因此, 差分格式 (3.3.8) 条件稳定, 稳定性条件是 $-1\leqslant r<0$ 或 $-1\leqslant a\dfrac{\Delta t}{\Delta x}<0$. □

关于初边值问题的稳定性, 如同在收敛性和相容性中一样, 我们假定有一空间网格剖分序列 $\{\Delta x_j\}$, 从而有一有限维空间序列 $\{X_j\}$, 其模为 $||\cdot||_j$. 我们称关于初边值问题的差分格式是稳定的, 假如该格式对模 $||\cdot||_j$ 满足不等式 (3.3.2) 或 (3.3.3) 式.

例 3 对初边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\quad x\in(0,1),\quad t>0 \tag{3.3.14}$$

$$u(x,0)=f(x),\quad x\in[0,1] \tag{3.3.15}$$

$$u(0,t)=u(1,t)=0,\quad t\geqslant 0 \tag{3.3.16}$$

的差分格式 (取 $\Delta x = 1/M$)

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r\delta_x^2 u_j^n, \quad j = 1, \cdots, M-1 \tag{3.3.17}$$

$$u_0^{n+1} = u_M^{n+1} = 0 \tag{3.3.18}$$

$$u_j^0 = f(j\Delta x) = 0, \quad j = 0, \cdots, M \tag{3.3.19}$$

证明当 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 时, 差分格式 (3.3.17)~(3.3.19) 稳定.

解　考虑 $[0,1]$ 区间上的任何一个剖分序列 $\{\Delta x_j\}$, 相应的空间为 $\{X_j\}$, 模为 $\|\cdot\|_j$. 假定 X_j 为 $M_j - 1$ 维向量空间, 其中 $M_j\Delta x_j = 1$. 现令 $\|\cdot\|_j$ 为上确界模.

当 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 时, 有

$$\begin{aligned}|u_j^{n+1}| &= |(1-2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)| \\ &\leqslant |(1-2r)| \cdot |u_j^n| + r|u_{j+1}^n| + r|u_{j-1}^n| \\ &\leqslant (1-2r)\|\boldsymbol{u}^n\|_j + r\|\boldsymbol{u}^n\|_j + r\|\boldsymbol{u}^n\|_j\end{aligned}$$

从而

$$\|\boldsymbol{u}^{n+1}\|_j \leqslant \|\boldsymbol{u}^n\|_j \tag{3.3.20}$$

重复利用该不等式, 得

$$\|\boldsymbol{u}^{n+1}\|_j \leqslant \|\boldsymbol{u}^0\|_j$$

因此, 差分格式 (3.3.17)~(3.3.19) 稳定.

□

§3.4 Lax 定理

定理 3.4.1 (Lax **等价定理**)　*对一个适定的线性初值问题, 一个相容的两层格式收敛当且仅当该格式稳定.*

由该定理知道, 只要有一个相容的格式, 则格式收敛性和稳定性等价. 如果相容的差分格式不稳定, 则也不收敛. 下面给出一个比上面定理更强形式的定理并加以证明.

定理 3.4.2 (Lax **等价定理**)　*假如一个两层格式*

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n + \Delta t G^n \tag{3.4.1}$$

关于模 $\|\cdot\|$ 对一个适定的线性初值问题精确到 (p,q) 阶且稳定, 则该格式关于模 $\|\cdot\|$ 是 (p,q) 阶收敛的.

证明 设 $\boldsymbol{v}^n$ 是初值问题的精确解, 因为差分格式精确到 $O(\Delta x^p)+O(\Delta t^q)$ 阶, 则 $\boldsymbol{v}^n$ 满足

$$\boldsymbol{v}^{n+1}=Q\boldsymbol{v}^n+\Delta t\boldsymbol{G}^n+\Delta t\boldsymbol{\tau}^n \tag{3.4.2}$$

其中 $\|\boldsymbol{\tau}^n\|=O(\Delta x^p)+O(\Delta t^q)$. 定义 $\boldsymbol{w}^n=\boldsymbol{v}^n-\boldsymbol{u}^n$, 则 $\boldsymbol{w}^n$ 满足

$$\boldsymbol{w}^{n+1}=Q\boldsymbol{w}^n+\Delta t\boldsymbol{\tau}^n \tag{3.4.3}$$

重复应用 (3.4.3) 式, 得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{w}^{n+1}&=Q\boldsymbol{w}^n+\Delta t\boldsymbol{\tau}^n\\&=Q(Q\boldsymbol{w}^{n-1}+\Delta t\boldsymbol{\tau}^{n-1})+\Delta t\boldsymbol{\tau}^n\\&=Q^2\boldsymbol{w}^{n-1}+\Delta tQ\boldsymbol{\tau}^{n-1}+\Delta t\boldsymbol{\tau}^n\\&=Q^{n+1}\boldsymbol{w}^0+\Delta t\sum_{j=0}^{n}Q^j\boldsymbol{\tau}^{n-j}\end{aligned} \tag{3.4.4}$$

因为 $\boldsymbol{w}^0=0$, 所以

$$\boldsymbol{w}^{n+1}=\Delta t\sum_{j=0}^{n}Q^j\boldsymbol{\tau}^{n-j} \tag{3.4.5}$$

差分格式稳定蕴含对任何 j, 存在非负常数 K 满足

$$\|Q^j\|\leqslant K \tag{3.4.6}$$

在 (3.4.5) 式两边取模并再利用 (3.4.6) 式, 得

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{w}^{n+1}\|&\leqslant\Delta t\sum_{j=0}^{n}\|Q^j\|\,\|\boldsymbol{\tau}^{n-j}\|\\&\leqslant\Delta tK\sum_{j=0}^{n}\|\boldsymbol{\tau}^{n-j}\|\\&=\Delta tK\sum_{j=0}^{n}C((n-j)\Delta t)(\Delta x^p+\Delta t^q)\\&\leqslant(n+1)\Delta tKC^*(t)(\Delta x^p+\Delta t^q)\end{aligned} \tag{3.4.7}$$

其中

$$C^*(t)=\sup_{0\leqslant s<t}C(s),\quad s=(n-j)\Delta t$$

$C(s)$ 是与 $\|\boldsymbol{\tau}^{n-j}\|$ 有关的常数. 考虑到收敛性定义 3.1.2, 取 $\Delta x,\Delta t\to0$ 且 $(n+1)\Delta t\to t$, 这时有

$$(n+1)\Delta tKC^*(t)(\Delta x^p+\Delta t^q)\to tKC^*(t)0=0 \tag{3.4.8}$$

即

$$||\boldsymbol{w}^{n+1}|| \to 0$$

注意 (3.4.7) 式可改写成

$$||\boldsymbol{u}^{n+1} - \boldsymbol{v}^{n+1}|| \leqslant K(t)(\Delta x^p + \Delta t^q)$$

$$= O(\Delta x^p) + O(\Delta t^q)$$

根据收敛阶定义 3.1.3, 收敛阶是 (p, q) 阶的.

□

注意在相容性和稳定性中使用的模应是一样的, 而且收敛性也是关于该模给出. 前面我们已证当 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 时, 显式格式 (3.3.7) 精确到 (2,1) 阶且关于上确界范数是稳定的. 因此, 根据 Lax 等价定理 3.4.2 知, 当 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 时, 差分格式 (3.3.7) 关于上确界模是 (2,1) 阶收敛的. 对于初边值问题的 Lax 定理, 只要定理 3.4.2 中的模 $||\cdot||$ 换成 $||\cdot||_j$ 即可. 另外, 我们看到, 考虑格式的相容性仅考虑逐点相容是不够的.

§3.5 稳定性分析方法

本节介绍差分格式稳定性分析的方法: Fourier 级数法 (也称 von Neumann 法)、矩阵分析法和能量法, 重点介绍前两种方法.

§3.5.1 Fourier 级数法(von Neumann 法)

考虑下面实直线 **R** 上的一个初值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in \mathbf{R}, \quad t > 0 \tag{3.5.1}$$

$$u(x,0) = f(x), \quad x \in \mathbf{R} \tag{3.5.2}$$

定义 u 关于 x 的空间 Fourier 变换为

$$\tilde{u}(\omega, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} u(x,t) e^{-\mathrm{i}\omega x} dx \tag{3.5.3}$$

逆 Fourier 变换为

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u}(\omega, t) e^{\mathrm{i}\omega x} d\omega \tag{3.5.4}$$

假定偏微分方程的解在 $\pm\infty$ 处足够好使得积分存在且在 $\pm\infty$ 处为零. Fourier 变换的一个性质是 **Parseval 等式**, 即

$$||u||_{L_2(R)} = ||\tilde{u}||_{L_2(R)}$$

Parseval 等式表示函数的模与其变换后的模在各自的空间中相等.

为分析关于初值问题差分格式的稳定性, 需要考虑离散 Fourier 变换. 假定在实或复 l_2 空间中给定向量 $\boldsymbol{u} = (\cdots, u_{-1}, u_0, u_1, \cdots)^T$. 定义

$$||\boldsymbol{u}||_{l_2} = \sqrt{\sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m|^2}$$

若特别强调空间离散步长的影响, 可定义

$$||\boldsymbol{u}||_{l_2,\Delta x} = \sqrt{\sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m|^2 \Delta x}$$

但这两种模等价, 我们不加区分.

定义 3.5.1 $\boldsymbol{u} \in l_2$ 的离散 Fourier 变换是函数 $\hat{u} \in L_2[-\pi, \pi]$, 定义为

$$\hat{u}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}m\xi} u_m \tag{3.5.5}$$

命题 3.5.1 若 $\boldsymbol{u} \in l_2$ 及 $\hat{u}$ 是 $\boldsymbol{u}$ 的离散 Fourier 变换, 则

$$u_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\mathrm{i}m\xi} \hat{u}(\xi) d\xi \tag{3.5.6}$$

证明

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\mathrm{i}m\xi} \hat{u}(\xi) d\xi \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\mathrm{i}m\xi} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi} u_j d\xi \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=-\infty}^{\infty} u_j \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\mathrm{i}(j-m)\xi} d\xi \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=-\infty, j\neq m}^{\infty} u_j \left[\frac{e^{-\mathrm{i}(j-m)\xi}}{-\mathrm{i}(j-m)} \right]_{-\pi}^{\pi} + \frac{1}{2\pi} u_m \int_{-\pi}^{\pi} d\xi \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=-\infty, j\neq m}^{\infty} u_m \frac{1}{\mathrm{i}(j-m)} [e^{\mathrm{i}(j-m)\pi} - e^{-\mathrm{i}(j-m)\pi}] + u_m \\
&= u_m
\end{aligned}$$

即

$$u_m = \frac{1}{2\pi} \int_{\pi}^{\pi} e^{\mathrm{i}m\xi} \hat{u}(\xi) d\xi$$

□

命题 3.5.2 若 $\boldsymbol{u} \in l_2$ 及 $\hat{u}$ 是 $\boldsymbol{u}$ 的离散 Fourier 变换, 则 Parseval 等式成立, 即

$$||\hat{u}||_{L_2[-\pi,\pi]} = ||\boldsymbol{u}||_{l_2} \tag{3.5.7}$$

证明

$$\begin{aligned}
||\hat{u}||^2_{L_2[-\pi,\pi]} &= \int_{-\pi}^{\pi} |\hat{u}(\xi)|^2 d\xi \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \overline{\hat{u}(\xi)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} u_m e^{-\mathrm{i}m\xi} u_m d\xi \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} u_m \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\mathrm{i}m\xi} \overline{\hat{u}(\xi)} d\xi \\
&= \sum_{m=-\infty}^{\infty} u_m \overline{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\mathrm{i}m\xi} \hat{u}(\xi) d\xi} \\
&= \sum_{m=-\infty}^{\infty} u_m \bar{u}_m = ||\boldsymbol{u}||^2_{l_2}
\end{aligned}$$

即

$$||\hat{u}||_{L_2[-\pi,\pi]} = ||\boldsymbol{u}||_{l_2} \tag{3.5.8}$$

□

回想在稳定性 3.3.1 定义中, 若取 l_2 能量模, 则不等式 (3.3.2) 变为

$$||\boldsymbol{u}^{n+1}||_{l_2} \leqslant K||\boldsymbol{u}^0||_{l_2} \tag{3.5.9}$$

但因为

$$||\boldsymbol{u}^{n+1}||_{l_2} = ||\hat{u}||_{L_2[-\pi,\pi]} = \sqrt{\Delta x}||\hat{u}||_{L_2}$$

假如能找到一个非负常数 K 满足

$$||\hat{u}^{n+1}||_{L_2[-\pi,\pi]} \leqslant K||\hat{u}^0||_{L_2[-\pi,\pi]} \tag{3.5.10}$$

则相同的 K 将满足 (3.5.9) 式. 当不等式 (3.5.10) 成立时, 表示序列 $\{\hat{u}^n\}$ 在变换空间 $L_2[-\pi,\pi]$ 中稳定. 因此 $\boldsymbol{u}$ 在 l_2 中的稳定性可通过其离散 Fourier 变换在其变换空间 $L_2[-\pi,\pi]$ 中来考虑. 因此, 我们有下述定理.

定理 3.5.1 序列 $\{u^n\}$ 在 l_2 中稳定当且仅当序列 $\{\hat{u}^n\}$ 在 $L_2[-\pi,\pi]$ 中稳定.

例 1 分析初值问题 (3.5.1)~(3.5.2) 的差分格式

$$u_j^{n+1} = ru_{j-1}^n + (1-2r)u_j^n + ru_{j+1}^n, \quad -\infty < j < \infty \tag{3.5.11}$$

的稳定性，其中 $r=\dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}$.

解 在方程 (3.5.11) 两边取离散 Fourier 变换，得

$$\begin{aligned}
\hat{u}^{n+1}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_j^{n+1} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}(ru_{j-1}^n+(1-2r)u_j^n+ru_{j+1}^n) \\
&= r\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_{j-1}^n+(1-2r)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_j^n+r\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_{j+1}^n \\
&= r\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_{j-1}^n+(1-2r)\hat{u}^n(\xi)+r\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_{j+1}^n \qquad (3.5.12)
\end{aligned}$$

作变量替换 $m=j\pm1$，得

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_{j\pm1}^n &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}(m\mp1)\xi}u_m^n \\
&= e^{\pm\mathrm{i}\xi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\mathrm{i}j\xi}u_j^n \\
&= e^{\pm\mathrm{i}\xi}\hat{u}(\xi) \qquad (3.5.13)
\end{aligned}$$

利用上式，(3.5.12) 式可化为

$$\begin{aligned}
\hat{u}^{n+1}(\xi) &= re^{-\mathrm{i}\xi}\hat{u}^n(\xi)+(1-2r)\hat{u}^n(\xi)+re^{\mathrm{i}\xi}\hat{u}^n(\xi) \\
&= [re^{-\mathrm{i}\xi}+(1-2r)+re^{\mathrm{i}\xi}]\hat{u}^n(\xi) \\
&= [2r\cos\xi+(1-2r)]\hat{u}^n(\xi) \\
&= (1-4r\sin^2\frac{\xi}{2})\hat{u}^n(\xi) \qquad (3.5.14)
\end{aligned}$$

在方程 (3.5.14) 中，$\hat{u}^n$ 的系数

$$G(\xi)\triangleq 1-4r\sin^2\frac{\xi}{2} \qquad (3.5.15)$$

称为差分格式 (3.5.11) 的**象征**，也常称为**传播因子**或**增长因子**. 增长因子也常记为 $G(\xi,t)$，以强调与时间步长 Δt 有关. 应用 (3.5.14) 式 $n+1$ 次，得

$$\hat{u}^{n+1}(\xi)=(1-4r\sin^2\frac{\xi}{2})^{n+1}\hat{u}^0(\xi) \qquad (3.5.16)$$

注意若限制 r 满足

$$|1-4r\sin^2\frac{\xi}{2}|\leqslant 1 \qquad (3.5.17)$$

则不等式 (3.5.10) 满足, 其中 $K=1$. 由 (3.5.17) 式解得 $r\leqslant\frac{1}{2}$. 因此 $r\leqslant\frac{1}{2}$ 是稳定性的充分条件.

当 $r>\frac{1}{2}$ 时, 至少对某些 ξ, 如 $\xi=\pi$, 我们有

$$4r\sin^2\frac{\xi}{2}>2$$

或

$$|1-4r\sin^2\frac{\xi}{2}|>1 \tag{3.5.18}$$

从而对任何 Δt (只要 $(n+1)\Delta t\to t$) 和 Δx, 只要 r 保持常数且大于 $\frac{1}{2}$, 对足够大的 n 值均有

$$|1-4r\sin^2\frac{\xi}{2}|^{n+1}>K \tag{3.5.19}$$

其中 K 为任意正数. 因此条件 (3.5.17) 也是稳定的必要条件. 因此, $r\leqslant\frac{1}{2}$ 是差分格式 (3.5.11) 稳定的充分必要条件. 再由 Lax 等价定理知, $r\leqslant\frac{1}{2}$ 也是该格式收敛的充分必要条件.

□

例 2 考虑偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0,\quad a<0 \tag{3.5.20}$$

的差分格式

$$u_j^{n+1}=(1+r)u_j^n-ru_{j+1}^n,\quad j=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{3.5.21}$$

的稳定性, 其中 $r=a\frac{\Delta t}{\Delta x}$.

解 易知对 (3.5.21) 式作离散 Fourier 变换, 得

$$\hat{u}^{n+1}(\xi)=(1+r)\hat{u}^n-re^{\mathrm{i}\xi}\hat{u}^n(\xi)=[(1+r)-r\cos\xi-\mathrm{i}r\sin\xi]\hat{u}^n(\xi)$$

于是

$$G(\xi)=1+r-r\cos\xi-\mathrm{i}r\sin\xi$$

为满足不等式 (3.5.10), 必须使 $|G(\xi)|\leqslant1$. 因

$$|G(\xi)|^2=(1+r)^2-2r(1+r)\cos\xi+r^2,\quad \xi[-\pi,\pi] \tag{3.5.22}$$

关于 ξ 微分, 并令其为零

$$\frac{\partial|G(\xi)|^2}{\partial\xi}=2r(1+r)\sin\xi=0$$

从而知道 ξ 在 0 和 $\pm\pi$ 处可能取得极大值, 又

$$|G(0)| = 1, \quad |G(\pm\pi)| = |1+2r|$$

所以要求 $|1+2r| \leqslant 1$, 因 $r<0$, 所以解得格式 (3.5.21) 的稳定性条件为 $r \geqslant -1$.

□

例 3 分析差分格式

$$\begin{aligned}&-\alpha r u_{j-1}^{n+1} + (1+2\alpha r)u_j^{n+1} - \alpha r u_{j+1}^{n+1}\\ =& (1-\alpha)r u_{j-1}^n + [1-2(1-\alpha)r]u_j^n + (1-\alpha)r u_{j+1}^n, \quad j=0,\pm1,\cdots\end{aligned} \tag{3.5.23}$$

的稳定性, 其中 $\alpha \in [0,1]$.

解 对 (3.5.23) 式两端作离散 Fourier 变换, 得

$$\begin{aligned}&-\alpha r e^{-\mathrm{i}\xi}\hat{u}^{n+1} + (1+2\alpha r)\hat{u}^{n+1} - \alpha r e^{\mathrm{i}\xi}\hat{u}^{n+1}\\ =& (1-\alpha)r e^{-\mathrm{i}\xi}\hat{u}^n + [1-2(1-\alpha)r]\hat{u}^n + (1-\alpha)r e^{\mathrm{i}\xi}\hat{u}^n\end{aligned} \tag{3.5.24}$$

化简得

$$\hat{u}^{n+1} = G(\xi)\hat{u}^n \tag{3.5.25}$$

其中

$$G(\xi) = \frac{1-4(1-\alpha)r\sin^2\dfrac{\xi}{2}}{1+4\alpha r\sin^2\dfrac{\xi}{2}} \tag{3.5.26}$$

下面求解不等式 $|G(\xi)| \leqslant 1$. 可以直接求解, 也可以采样下面的方法. 计算 $G(\xi)$ 对 ξ 的一次导数, 并令其为零

$$\frac{\partial G}{\partial \xi} = \frac{-4r\sin\dfrac{\xi}{2}\cos\dfrac{\xi}{2}}{1+4\alpha r\sin^2\dfrac{\xi}{2}} = 0$$

得到极值点 $\xi = 0, \pm\pi$. 注意

$$G(0) = 1, \quad G(\pm\pi) = \frac{-4(1-\alpha)r}{1+4\alpha r}$$

易知, $\dfrac{-4(1-\alpha)r}{1+4\alpha r} \leqslant 1$ 恒成立, 所以由

$$-1 \leqslant \frac{-4(1-\alpha)r}{1+4\alpha r} \tag{3.5.27}$$

解得

当 $\alpha \geqslant \dfrac{1}{2}, r > 0$ 时, (3.5.27) 成立, 即 $|G(\xi)| \leqslant 1$.

当 $\alpha < \dfrac{1}{2}$ 时, $r \leqslant \dfrac{1}{2(1-2\alpha)}$, (3.5.27) 成立, 即 $|G(\xi)| \leqslant 1$.

因此, 当 $\alpha \geqslant \dfrac{1}{2}$ 时, 格式 (3.5.23) 无条件稳定; 当 $\alpha < \dfrac{1}{2}$ 时, 格式条件稳定, 稳定性条件为 $r \leqslant \dfrac{1}{2(1-2\alpha)}$.

□

例 4 考虑偏微分方程

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + bv, \quad t > 0, x \in \mathbf{R} \tag{3.5.28}$$

的差分格式

$$u_j^{n+1} = ru_{j-1}^n + (1 - 2r + b\Delta t)u_j^n + ru_{j+1}^n, \quad j = \pm 1, \cdots \tag{3.5.29}$$

的收敛性.

解 与前面一样, 可求得差分格式 (3.5.29) 的象征, 为

$$G(\xi) = (1 - 4r\sin^2\frac{\xi}{2}) + b\Delta t \tag{3.5.30}$$

由例 1 的计算知当 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 时,

$$|(1 - 4r\sin^2\frac{\xi}{2}) + b\Delta t| \leqslant 1 + b\Delta t \leqslant e^{b\Delta t} \tag{3.5.31}$$

因此, 我们得到

$$\|\hat{u}^{n+1}\|_{L_2[-\pi,\pi]} \leqslant e^{b\Delta t}\|\hat{u}^n\|_{L_2[-\pi,\pi]} \leqslant e^{b(n+1)\Delta t}\|\hat{u}^0\|_{L_2[-\pi,\pi]} \leqslant K\|\hat{u}^0\|_{L_2[-\pi,\pi]}$$

其中 $K = e^{bT}$, 且假定 $0 < (n+1)\Delta t \leqslant T$, 即序列 $\{\hat{u}^n\}$ 在 $L_2[-\pi,\pi]$ 中稳定, 由定理 3.5.1 知, 格式 (3.5.29) 关于 l_2 模稳定, 稳定性条件是 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$.

□

注意例 2、例 3 和例 4 由 $|G(\xi)| \leqslant 1$ 求得的稳定性条件都是必要条件, 但由下面的讨论我们将看到, 这三例中的必要条件也都是充分条件, 因为所考虑的差分格式都是两层格式.

定理 3.5.2 *差分格式*

$$u^{n+1} = Qu^n \tag{3.5.32}$$

关于 l_2 模是稳定的当且仅当存在正常数 Δt_0 和 Δx_0 及非负常数 K 使得

$$|G(\xi)|^{n+1} \leqslant K \tag{3.5.33}$$

对 $0 < \Delta t \leqslant \Delta t_0, 0 < \Delta x \leqslant \Delta x_0$ 和所有 $\xi \in [-\pi,\pi]$ 成立, 其中 $G(\xi)$ 是差分格式 (3.5.32) 的象征.

证明 必要性 对 (3.5.33) 两端同乘 $\hat{u}^0(\xi)^2$, 然后两端从 $-\pi$ 到 π 积分, 也得序列 $\{\hat{u}^n\}$ 在 $L_2[-\pi,\pi]$ 中稳定, 由定理 3.5.1 知, 序列 $\{u^n\}$ 在 $l_2[-\pi,\pi]$ 中稳定得证.

充分性 用反证法. 已知差分格式关于 l_2 模稳定. 假定对每个 K, 存在一个 ξ_j 使得

$$|G(\xi_j)|^{n+1} > K \tag{3.5.34}$$

因为假定 $G(\xi)$ 是连续的, 所以我们能找到一个关于 ξ_j 的区间 I_j, 使得不等式 (3.5.34) 对所有 $\xi \in I_j$ 满足. 选择一个在区间 I_j 外为零的函数 $\hat{u}^0(\xi)$, 对方程 (3.5.34) 两端乘以 $\hat{u}^0(\xi)^2$ 并从 $-\pi$ 到 π 对 ξ 积分, 得

$$||G(\xi)^{n+1}\hat{u}^0||^2 > K||\hat{u}^0||^2$$

也就是我们找到了一个 ξ_j 和 $\hat{u}^0$, 使得序列 $\hat{u}^n(\xi)$ 不稳定, 即

$$||\hat{u}^{n+1}(\xi)||_{L_2[-\pi,\pi]} > K||\hat{u}^{n+1}(\xi)||_{L_2[-\pi,\pi]}$$

由定理 3.5.1 知, 格式关于 l_2 不稳定, 这与已知条件矛盾.

□

定理 3.5.3 *差分格式*

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n \tag{3.5.35}$$

关于 l_2 模稳定, 当且仅当存在正常数 $\Delta t_0, \Delta x_0$ 和 C, 使得

$$G(\xi) \leqslant 1 + C\Delta t \tag{3.5.36}$$

对 $0 < \Delta t \leqslant \Delta t_0, 0 < \Delta x \leqslant \Delta x_0$ 和所有 $\xi \in [-\pi,\pi]$ 都成立.

证明 必要性 因为

$$|G(\xi)| \leqslant 1 + C\Delta t \leqslant e^{C\Delta t}$$

所以

$$|G(\xi)|^{n+1} \leqslant e^{(n+1)C\Delta t} \leqslant e^{CT} = K$$

这里 $0 < (n+1)\Delta t \leqslant T$. 因此根据定理 3.5.2 差分格式稳定.

充分性 用反证法. 假定条件 (3.5.36) 不满足, 也即对每个 $C > 0$, 存在一个 $\xi_c \in [-\pi,\pi]$, 使得

$$|G(\xi_c)| > 1 + C\Delta t$$

选择一个序列 $\{C_j\}$ 使得当 $j \to \infty$ 时, $C_j \to \infty$, 于是有

$$|G(\xi_c)|^{n+1} \to \infty, j \to \infty$$

因此, $|G(\xi_c)|^{n+1}$ 无界, 由定理 3.5.2 推出格式稳定, $|G(\xi)|^{n+1}$ 有界, 矛盾.

□

不等式 (3.5.36) 称为 **von Neumann 条件**. 由定理 3.5.3 知, 对两层格式, von Neumann 条件是格式稳定的充要条件. 但对多层格式仅是必要条件, 若差分格式不等式满足 von Ncumann 条件, 则格式不稳定, 或假设格式稳定, 则必须满足 von Neumann 条件.

定理 3.5.4 *若差分格式*

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n \tag{3.5.37}$$

稳定, 则差分格式

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = (Q + b\Delta t I)\boldsymbol{u}^n \tag{3.5.38}$$

对任何数 b 稳定.

证明 显然, 差分格式 (3.5.38) 的象征为

$$G_1 = G + b\Delta t$$

其中 G 是差分格式 (3.5.37) 的象征, 假如差分格式 (3.5.37) 稳定, 则由定理 3.5.3 知, 对某个 C, G 满足

$$|G| \leqslant 1 + C\Delta t$$

因此, G_1 满足

$$|G_1| \leqslant |G| + |b|\Delta t \leqslant 1 + (C + |b|)\Delta t$$

再次使用定理 3.5.3, 知差分格式 (3.5.38) 也稳定.

□

上面考虑的是初边值的 Fourier 级数法的稳定性分析, 如 (3.5.5) 式所示, 离散 Fourier 变换是定义在整个实数轴 **R** 上. 对初边值问题, 首先要利用周期延拓拓的方法, 将函数延拓到整个实数轴, 然后再用离散 von Neumann 方法来分析.

现考虑如下初边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0, l), \quad t > 0 \tag{3.5.39}$$

$$u(0, t) = u(l, t) = 0 \tag{3.5.40}$$

$$u(x, 0) = f(x) \tag{3.5.41}$$

的差分格式

$$u_j^{n+1} = r u_{j-1}^n + (1 - 2r) u_j^n + r u_{j+1}^n, \quad j = 1, \cdots, M - 1 \tag{3.5.42}$$

$$u_0^{n+1} = 0, \quad u_M^{n+1} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.5.43}$$

$$u_j^0 = f(j\Delta x), \quad j = 0, \cdots, M \tag{3.5.44}$$

的稳定性, 其中 $r=\dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}$.

设 $\bar{u}_j^n$ 是定义在结点 $j=0,\cdots,M$ 上的离散值, 构造函数

$$u^n(x)=\begin{cases}\bar{u}_j^n & x_j-\dfrac{\Delta x}{2}<x<x_j+\dfrac{\Delta x}{2}\\ 0 & x_0<x<x_0+\dfrac{\Delta x}{2} \text{ 或 } x_M-\dfrac{\Delta x}{2}\leqslant x_M\end{cases}$$

然后关于 $x=0$ 作奇延拓, 再周期性地延拓到整个实轴上. 这样 $u^n(x)$ 就是定义在实数轴上周期为 $[-l,l]$ 的周期函数. 再根据复数形式的 Fourier 级数或定义 3.5.1, 函数 $u^n(x)$ 可以表示成

$$u^n(x)=\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^n e^{\mathrm{i}\frac{k\pi x}{l}} \tag{3.5.45}$$

其中

$$C_k^n=\frac{1}{2l}\int_{-l}^{l}u^n(x)e^{-\mathrm{i}\frac{k\pi x}{l}}dx,\quad k=0,\pm1,\pm2.$$

其中 $x=j\Delta x$, 在 C_k^n 上的上标 n 表示 C 依赖于 t. 假如要求函数 (3.5.45) 在每个结点上满足方程 (3.5.42), 则得

$$\begin{aligned}u_j^{n+1}&=\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^{n+1}e^{\mathrm{i}\frac{k\pi x}{l}}\\&=ru_{j-1}^n+(1-2r)u_j^n+ru_{j+1}^n\\&=r\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^n e^{\mathrm{i}\frac{k\pi(x-\Delta x)}{l}}+(1-2r)\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^n e^{\mathrm{i}\frac{k\pi x}{l}}+r\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^n e^{\mathrm{i}\frac{k\pi(x+\Delta x)}{l}}\\&=\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^n(1-4r\sin^2\frac{k\pi\Delta x}{2l})e^{\mathrm{i}\frac{k\pi x}{l}}\end{aligned}$$

所以

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^{n+1}e^{\mathrm{i}\frac{k\pi x}{l}}=\sum_{k=-\infty}^{\infty}C_k^n(1-4r\sin^2\frac{k\pi\Delta x}{2l})e^{\mathrm{i}\frac{k\pi x}{l}}$$

两边乘以 $e^{\frac{-\mathrm{i}k\pi x}{l}}$ 再对 k 从 $-\infty$ 到 ∞ 求和, 得

$$C_k^{n+1}=C_k^n(1-4r\sin^2\frac{k\pi\Delta x}{2l}) \tag{3.5.46}$$

方程 (3.5.46) 表示 C_k^n 作为函数的一个方程. 令

$$G(\sigma,\Delta t)=1-4r\sin^2(\sigma\Delta x),\quad \sigma=\frac{k\pi}{2l} \tag{3.5.47}$$

于是由 (3.5.46) 式得

$$\|C^{n+1}\|_{l_2} = \|C^0 G^{n+1}\|_{l_2} \leqslant \|C^0\|_{l_2} \cdot |G^{n+1}|$$

要使格式稳定, 必有 $|G|^{n+1} \leqslant K$(其中 K 为某非负常数), 这等价于 $|G| \leqslant 1 + C\Delta t$. 因此由 (3.5.46) 式可知, von Neumann 条件正好是限制任意结点的有限 Fourier 系数不无界增长的条件. 注意离散 von Neumann 稳定性分析不考虑边界条件, 这意味着当边界条件不引起不稳定性时, 格式是稳定的.

实际上我们还可以只考虑一个离散 Fourier 分量. 以初值问题为例, 即考虑分量

$$u_j^n = \hat{u}^n(\xi)e^{\mathrm{i}j\xi\Delta x} \tag{3.5.48}$$

其中 $-\infty \leqslant j \leqslant \infty$. $\xi \in [-\pi, \pi]$ 表示任一波数分量. 对例 1 来说, 将分量代入 (3.5.11) 式中, 得到

$$\begin{aligned}
u_j^{n+1} &= \hat{u}(\xi)^{n+1}e^{\mathrm{i}j\xi\Delta x} \\
&= ru_{j-1}^n + (1-2r)u_j^n + ru_{j+1}^n \\
&= r\hat{u}^n(\xi)e^{\mathrm{i}(j-1)\xi\Delta x} + (1-2r)\hat{u}^n(\xi)e^{\mathrm{i}j\xi\Delta x} + r\hat{u}^n(\xi)e^{\mathrm{i}(j+1)\xi\Delta x} \\
&= \hat{u}^n(\xi)e^{\mathrm{i}j\xi\Delta x}(re^{-\mathrm{i}j\xi\Delta x} + (1-2r) + re^{\mathrm{i}j\xi\Delta x})
\end{aligned}$$

由此得到

$$\hat{u}^{n+1}(\xi) = \hat{u}^n(\xi)G(\xi, \Delta t)$$

其中

$$\begin{aligned}
G(\xi, \Delta t) &= re^{-\mathrm{i}\xi\Delta x} + (1-2r) + re^{\mathrm{i}\xi\Delta x} \\
&= 1 - 2r(1 - \cos\xi\Delta x) \\
&= 1 - 4r\sin^2\frac{\xi\Delta x}{2}
\end{aligned}$$

由 $|G(\xi, \Delta t)| \leqslant 1$ 解得稳定性条件为 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$. 该条件为充分条件. 与前面的例 1 中的结果一样.

对初边值问题的差分格式 (3.5.42)~(3.5.44). 可考虑级数表达式 (3.5.45) 中的任一项

$$u^n(x) = C_k^n e^{\frac{\mathrm{i}k\pi x}{l}}$$

即 $u_j^n = C_k^n e^{\frac{\mathrm{i}jk\pi\Delta x}{l}}$, 将其代入差分格式 (3.5.42), 同样可解得 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$.

上面采用 Fourier 叶分量的形式进行 Fourier 分析的方法称为**离散** von Neumann **稳定性分析**.

在用 Fourier 级数法分析三层或多层问题的差分格式时, 增长因子变成增长矩阵, 根据前面的稳定性分析及

$$[\rho(G(\sigma,\Delta t))]^n = \rho[G^n(\sigma,\Delta t)] \leqslant \|G^n(\sigma,\Delta t)\| \leqslant K$$

再注意到上式与

$$\rho(G(\sigma,\Delta t)) \leqslant 1 + C\Delta t \tag{3.5.49}$$

的等价性, 知 von Neumann 必要条件是 (3.5.49) 式. 在某些情况下, 该条件可成为充分条件.

定理 3.5.5 如果对 $0 < \Delta t < \Delta t_0$ 及所有波数 σ, $G(\sigma,\Delta t)$ 有界, 且 G 的所有 M 个特征值都位于单位圆内部（可以有一个除外）, 即

$$|\lambda_1| \leqslant 1 + C\Delta t$$

$$|\lambda_i| \leqslant \delta < 1, \quad i = 2, \cdots, M$$

则 von Neumann 条件是关于矩阵 2− 范数稳定的充分必要条件.

证明 为简单起见, 考虑三层格式, 这时增长因子 $G(\sigma,\Delta t)$ 为二阶矩阵. 由 Schur 定理 1.3.9, 对矩阵 G, 存在酉矩阵 U, 使得

$$B = U^H G U \tag{3.5.50}$$

为上三角阵, 即

$$B = \begin{bmatrix} \lambda_1 & b_{12} \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

所以

$$B^n = \begin{bmatrix} \lambda_1^{(n)} & b_{12}^{(n)} \\ 0 & \lambda_2^{(n)} \end{bmatrix}$$

其中 $b_{12}^{(n)} = b\sum_{j=1}^{n-1} \lambda_1^{n-1-j}\lambda_2^j$. 又 $G = UBU^H$, 故 $G^n = UB^nU^H$. 对酉矩阵 U, 有 $\|U\|_2 = \|U^H\|_2 = 1$, 所以只需证明 $B^n(\sigma,\Delta t)$ 对 $0 < \Delta t < \Delta t_0$ 和一切 σ 一致有界即可.

当 von Neumann 条件成立时, 存在常数 C_1, 使 $|\lambda_1|^n \leqslant C_1$, 所以

$$|b_{12}^{(n)}| \leqslant |b|C_1 \sum_{j=0}^{\infty} |\lambda_2|^j \tag{3.5.51}$$

由 (3.5.50) 式知 $|b|$ 有界, 又

$$\sum_{j=0}^{\infty} |\lambda_2|^j \leqslant \sum_{j=1}^{\infty} \delta^j$$

这样 $\sum_{j=1}^{\infty}\delta^j$ 是公比小于 1 的几何级数, 该级数收敛. 因此, $|b^{(k)}|$ 一致有界. 又 $|\lambda_1|^k$ 与 $|\lambda_2|^k$ 一致有界, 故 $B^n(\sigma,\Delta t)$ 对 $0<\Delta t<\Delta t_0$ 和任意 σ 一致有界, 也即 $||G^n(\sigma,\Delta t)||_2<\infty$ 成立. 由稳定性命题 3.3.1 知, 格式稳定.

□

推论 3.5.1 若 $G(\sigma,\Delta t)$ 有互不相同的特征值, 则 von Neumann 条件是关于矩阵 2− 范数稳定的充分必要必要条件.

证明 因为 G 有互不相同的特征值, 所以在单位圆上的特征值只能有一个, 根据定理 3.5.5, 可得结论.

□

为证明最后一个稳定性的充分性定理, 先给出如下引理. 为简单起见, 将 $G(\sigma,\Delta t)$ 简记为 $G(\sigma)$.

引理 3.5.1 设 $G(\sigma)$ 连续, $G(\sigma_0)$ 有 n 个不同的特征值, 则存在 $\varepsilon>0$, 使得当 $\sigma\in(\sigma_0-\varepsilon,\sigma_0+\varepsilon)$ 时, 有

$$D(\sigma)=S(\sigma)^{-1}G(\sigma)S(\sigma)$$

其中 $D(\sigma)$ 是对角阵, $S(\sigma)$ 是正规矩阵.

该引理的证明读者自己思考.

引理 3.5.2 设 G 连续, $G^{(\mu)}(\sigma_0)=\gamma_\mu I,\mu=0,\cdots,k-1$, $G^{(k)}(\sigma_0)$ 有 n 个不同的特征值, 则存在 $\varepsilon>0$, 使得当 $\sigma\in(\sigma_0-\varepsilon,\sigma_0+\varepsilon)$ 时, 均有

$$D(\sigma)=S(\sigma)^{-1}G(\sigma)S(\sigma)$$

其中 $D(\sigma)$ 是对角矩阵, $S(\sigma)$ 是一个正规矩阵, $G^{(\mu)}(\sigma)$ 表示 $G(\sigma)$ 关于 σ 的 μ 阶导数矩阵.

证明 将 $G(\sigma)$ 在 σ_0 处作 Taylor 展开, 得

$$G(\sigma)=I\sum_{\mu}^{k-1}\frac{1}{\mu!}\gamma_\mu(\sigma-\sigma_0)^\mu+\frac{1}{k!}(\sigma-\sigma_0)^kG(\sigma)$$

G 连续, $G^{(s)}(\sigma_0)$ 有 n 个不同特征值, 由引理 3.5.1 知结论成立.

□

定理 3.5.6 设 $G(\sigma)$ 是 n 阶增长矩阵, 若对任意波数 σ, 满足条件 (1) $G^{(\mu)}(\sigma)=\gamma_\mu I,\mu=0,\cdots,s-1$; (2) $G^{(s)}(\sigma)$ 有 n 个不同的特征值, 则 von Neumann 稳定性条件是充分必要条件. 其中 $G^{(\mu)}(\sigma)$ 表示 $G(\sigma)$ 关于 σ 的 μ 阶导数矩阵.

证明 $G(\sigma_0)$ 满足引理 3.5.2 的条件, 故对所有 $\sigma \in (\sigma_0-\varepsilon, \sigma_0+\varepsilon)$, 有

$$D(\sigma)=S(\sigma)^{-1}G(\sigma)S(\sigma)$$

于是有

$$G(\sigma)^n = S(\sigma)D(\sigma)^n S(\sigma)^{-1}$$

其中对角矩阵 $D(\sigma)$ 由 $G(\sigma)$ 的特征值构成. 令

$$\tilde{K}=\max_{\sigma\in[\sigma_0-\sigma,\sigma_0+\sigma]}\|S(\sigma)\|_2\,\|S(\sigma)^{-1}\|_2$$

再根据 von Neumann 条件有

$$\|G^n(\sigma)\|_2 \leqslant \tilde{K}\|D(\sigma)\|_2^n = \tilde{K}\|\rho(D(\sigma))\|_2^n = \tilde{K}\|\rho(G)\|_2^n \leqslant \tilde{K}e^{CT} = K < \infty$$

即稳定.

□

下面考虑一个三层差分格式的稳定性条件.

例 5 考虑一维热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

的五点差分格式

$$\frac{3}{2}\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}-\frac{1}{2}\frac{u_j^n-u_j^{n-1}}{\Delta t}=a\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$

的稳定性.

解 该格式是一个三层差分格式. 令 $u_j^{n-1}=v_j^n$, 可将其化为

$$\begin{cases}3(u_j^{n+1}-u_j^n)-(u_j^n-v_j^n)=2r(u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1})\\ u_j^{n-1}=v_j^n\end{cases}$$

其中 $r=\dfrac{a\Delta t}{\Delta x^2}$. 从而可写成

$$\begin{bmatrix}2r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_{j-1}^{n+1}\\ v_{j-1}^{n+1}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}-4r-3 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_j^{n+1}\\ v_j^{n+1}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}2r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_{j+1}^{n+1}\\ v_{j+1}^{n+1}\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}-4 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_j^n\\ v_j^n\end{bmatrix}$$

设 $\boldsymbol{w}_j^n=(u_j^n,v_j^n)^T$, 则上式可写成

$$\begin{bmatrix}2r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{w}_{j-1}^{n+1}+\begin{bmatrix}-4r-3 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\boldsymbol{w}_j^{n+1}+\begin{bmatrix}2r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{w}_{j+1}^{n+1}=\begin{bmatrix}-4 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{w}_j^n$$

令 $w_j^n = \hat{w}(\xi)e^{\mathrm{i}j\xi\Delta x}$ 代入上式, 则得

$$\begin{bmatrix} -3-8r\sin^2\sigma & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \hat{w}^{n+1}(\xi) = \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \hat{w}^n(\xi)$$

其中 $\sigma = \dfrac{\xi\Delta x}{2}$. 于是

$$\hat{\mathbf{w}}^{n+1}(\xi) = \begin{bmatrix} -\dfrac{4}{3+8r\sin^2\sigma} & -\dfrac{1}{3+8r\sin^2\sigma} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \hat{\mathbf{w}}^n(\xi)$$

因此得增长矩阵为

$$G = \begin{bmatrix} \dfrac{4}{3+8r\sin^2\sigma} & -\dfrac{1}{3+8r\sin^2\sigma} \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

G 的特征值 λ 应满足方程

$$\lambda^2 - b\lambda + c = 0, \quad b = \frac{4}{3+8r\sin^2\sigma}, \quad c = -\frac{1}{3+8r\sin^2\sigma}$$

根据定理 1.5.1, 欲使两根按模不大于 1 且其中一根严格小于 1, 应满足

$$|b| \leqslant 1 - c, \quad |c| < 1$$

易验证上述不等式对任意 $r > 0$ 均成立. 因此格式绝对稳定.

□

§3.5.2 矩阵分析法

上面介绍了初边值问题稳定性分析的 Fourier 级数法, 对初边值问题, 还可以用矩阵法来进行分析. 初边值问题的差分格式可以写成下面的形式

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n \tag{3.5.52}$$

如果是隐式格式

$$Q_1\boldsymbol{u}^{n+1} = Q_2\boldsymbol{u}^n$$

则可变成

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = Q_1^{-1}Q_2\boldsymbol{u}^n = Q^{-1}\boldsymbol{u}^n$$

还是 (3.5.52) 式的形式. 根据命题 3.3.1, 稳定性需要寻找满足不等式 (3.3.4) 的 K. 要计算 Q^{n+1} 的模是困难的. 若 $\rho(Q)$ 为矩阵 Q 的谱半径, 因为 $\rho(Q) \leqslant \|Q\|$ 恒成立, 于是得到下面的结果.

定理 3.5.7 差分格式 (3.5.52) 稳定的必要条件是

$$\rho(Q) \leqslant 1 + C\Delta t \tag{3.5.53}$$

其中 C 是某一与 Δt 无关的非负常数.

证明 若格式稳定, 则根据命题 3.3.1, 有

$$||Q^{n+1}|| \leqslant K \tag{3.5.54}$$

其中 K 为某非负常数, 于是

$$[\rho(Q)]^{n+1} = \rho(Q^{n+1}) \leqslant ||Q^{n+1}|| \leqslant K \tag{3.5.55}$$

下面证明 (3.5.53) 式与 (3.5.54) 式等价.

显然若 (3.5.53) 式成立, 则

$$[\rho(Q)]^{n+1} \leqslant (1 + C\Delta t)^{n+1} \leqslant e^{C\Delta t(n+1)} = e^{CT} \tag{3.5.56}$$

其中 T 为某常数, 取 $K = e^{CT}$, 即为 (3.5.54) 式.

若 (3.5.54) 式成立, 特别地取 $n = [\frac{T}{\Delta t}]$($[\cdot]$ 表示取整), 则

$$\begin{aligned}
\rho(A) &\leqslant K^{\frac{1}{n+1}} \leqslant K^{\frac{\Delta t}{T+\Delta t}} = e^{\frac{\Delta t}{T+\Delta t}\ln K} \\
&= 1 + \Delta t(\frac{\ln K}{T+\Delta t}) + \frac{\Delta t^2}{2}(\frac{\ln K}{T+\Delta t})^2 + \frac{\Delta t^3}{3!}(\frac{\ln K}{T+\Delta t})^3 + \cdots \\
&= 1 + \frac{\Delta t \ln K}{T+\Delta t}[1 + \frac{\Delta t}{2}\frac{\ln K}{T+\Delta t} + \frac{\Delta t^2}{3!}(\frac{\ln K}{T+\Delta t})^2 + \cdots] \\
&\leqslant 1 + \frac{\Delta t \ln K}{T+\Delta t}[1 + \Delta t\frac{\ln K}{T+\Delta t} + \frac{\Delta t^2}{2}(\frac{\ln K}{T+\Delta t})^2 + \cdots] \\
&= 1 + \frac{\Delta t \ln K}{T+\Delta t} e^{\frac{\Delta t \ln K}{T+\Delta t}} \\
&\leqslant 1 + \Delta t \frac{\ln K}{T} e^{\Delta t_0 \ln K}, \quad \Delta t \leqslant \Delta t_0 \\
&= 1 + C\Delta t
\end{aligned}$$

其中 $C = \frac{\ln K}{T} e^{\Delta t_0 \ln K}$. 此即 (3.5.53) 式.

□

实际上, (3.5.53) 式是 von Neumann 条件在稳定性的矩阵分析下的表示, 也称为 **von Neumann 条件**. von Neumann 条件是稳定性的必要条件, 在某些情况下, 可成为差分格式 (3.5.52) 的充分条件.

定理 3.5.8 若 Q 是对称的, 则 von Neumann条件是差分格式关于矩阵 2− 范数稳定的充分必要条件.

证明　若 von Neumann 条件成立, 则对对称矩阵 Q, 有如下事实

$$\|Q^{n+1}\|_2 = \rho(Q^{n+1}) = [\rho(Q)]^{n+1} \leqslant (1 + C\Delta t)^{n+1} \leqslant e^{C\Delta t(n+1)} \leqslant e^{CT}$$

因此, 取 $K = e^{CT}$, 则不等式 (3.3.4) 满足.

□

定理 3.5.8 中矩阵 Q 的对称性可以放宽到 Q 与一个对称矩阵相似, 即有下面的结论.

定理 3.5.9　若 Q 与一个对称矩阵以 $\|S\|$ 和 $\|S^{-1}\|$ 一致有界的方式相似 (S 为相似变换), 则 von Neumann 条件是关于矩阵 2− 范数稳定的充分必要条件.

证明　假如 Q 与 $\tilde{Q}$ 相似, 则 Q 和 $\tilde{Q}$ 有相同的特征值, 所以有相同的谱半径, 即 $\rho(Q) = \rho((\tilde{Q}))$, 又

$$Q^n = (S\tilde{Q}S^{-1})^n = S\tilde{Q}^nS^{-1}$$

及 von Neumann 条件成立, 于是

$$\|Q^n\|_2 \leqslant \|S\|_2\ \|\tilde{Q}^n\|_2\ \|S^{-1}\|_2 = \|S\|_2\ \|S^{-1}\|_2\ [\rho(Q)]^n \leqslant e^{CT}\|S\|_2\ \|S^{-1}\|_2 = K$$

因此格式稳定.

□

推论 3.5.2　若 Q 有互不相同的特征值, 则 von Neumann 条件是关于矩阵 2− 范数稳定的充分必要条件.

证明　因 Q 有互不相同的特征值, 所以存在非奇异矩阵 S, 使得

$$SQS^{-1} = D$$

其中 D 是对角矩阵, 对角元素由 Q 的特征值组成. 上式表明 Q 与 D 相似, 根据定理 3.5.9, 知 von Neumann 条件是稳定性的充分条件.

□

定理 3.5.10　如果 Q 是正规矩阵, 则 von Neumann 条件是关于矩阵 2− 范数稳定的充分必要条件.

证明　当 Q 是正规矩阵时, Q^n 也为正规矩阵, 而正规矩阵的 $\|\cdot\|_2$ 模等于谱半径, 故有

$$\|Q^n\|_2 = \rho(Q^n) = [\rho(Q)]^n \leqslant (1 + C\Delta t)^n \leqslant e^{Cn\Delta t} \leqslant e^{CT} = K \tag{3.5.57}$$

即格式稳定.

□

可以验证, 实对称矩阵, 酉矩阵 ($Q^HQ=I$) 和 Hermite 矩阵 ($Q^H=Q$) 都是正规矩阵. 这里 H 表示复共轭转置.

定理 3.5.11 若 Q^HQ 的谱半径满足

$$\rho(Q^HQ)\leqslant 1+C\Delta t \tag{3.5.58}$$

则 von Neumann 条件是关于矩阵 2− 范数稳定的充分必要条件.

证明一 由于 Q^HQ 是正规矩阵, 所以结论可直接由定理 3.5.11 得出.

证明二 注意矩阵 Q 的 2− 范数是矩阵 Q^HQ 的谱半径的平方根. 因为

$$\begin{aligned}||Q||_2^2&=\sup_{||v||_2=1}||Qv||_2^2=\sup_{||v||_2=1}||(Qv)^H||_2\cdot\sup_{||v||_2=1}||(Qv)||_2\\&=\rho(Q^HQ)\leqslant 1+C\Delta t\end{aligned} \tag{3.5.59}$$

所以

$$||Q||_2^n\leqslant(1+C\Delta t)^{\frac{n}{2}}\leqslant e^{CT/2}=K$$

因此稳定.

□

定理 3.5.12 若 $\rho(Q)<1$, 则 von Neumann 条件是关于矩阵 2 范数稳定的充分必要条件.

证明 根据定理 1.4.5, 由于 $\rho(Q)<1$, 故存在 Q 的某种从属矩阵范数 $||\cdot||_s$, 使得 $||Q||_s<1$, 从而 $\rho(Q)<||Q||_s<1$, 所以

$$\rho(Q^n)<||Q^n||_s\leqslant||Q||_s^n<1$$

即 $||Q^n||_s<1$, 再利用矩阵范数的等价性, 存在某正常数 K, 有

$$||Q^n||_2\leqslant K||Q^n||_s<K$$

因此格式稳定.

□

例 6 分析差分格式

$$\boldsymbol{u}^{n+1}=\begin{bmatrix}u_1^{n+1}\\u_2^{n+1}\\\vdots\\u_{M-2}^{n+1}\\u_{M-1}^{n+1}\end{bmatrix}=Q\boldsymbol{u}^n=\begin{bmatrix}1-2r&r&&&\\r&1-2r&r&&\\&\ddots&\ddots&\ddots&\\&&r&1-2r&r\\&&&r&1-2r\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_1^n\\u_2^n\\\vdots\\u_{M-2}^n\\u_{M-1}^n\end{bmatrix} \tag{3.5.60}$$

的稳定性.

解　矩阵 Q 的特征值是

$$\lambda_j = 1 - 2r + 2r\cos\frac{j\pi}{M} = 1 - 4r\sin^2\frac{j\pi}{2M}$$

于是 Q 的谱半径为

$$\rho(Q) = \left|1 - 4r\sin^2\frac{(M-1)\pi}{2M}\right|$$

由 $\rho(Q) \leqslant 1$ 解得

$$r \leqslant \frac{1}{2\sin^2\dfrac{(M-1)\pi}{2M}} \tag{3.5.61}$$

为对所有的 $\Delta x(0 < \Delta x \leqslant \Delta x_0)$ 即所有充分大的 M 满足条件 (3.5.61), 取 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 即可. 又因为 Q 对称, 由定理 3.5.8 知条件 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$ 是差分格式 (3.5.60) 稳定的充分必要条件.

□

例 7　考虑初边值问题 $(a < 0)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad x \in (0,1), t > 0 \tag{3.5.62}$$

$$u(1,t) = 0, \quad t > 0 \tag{3.5.63}$$

$$u(x,0) = f(x), \quad x \in [0,1] \tag{3.5.64}$$

的差分格式

$$u_j^{n+1} = (1+r)u_j^n - ru_{j+1}^n, \quad j = 0, \cdots, M-1 \tag{3.5.65}$$

$$u_M^n = 0, \quad n = 1, 2, \cdots \tag{3.5.66}$$

$$u_j^0 = f(j\Delta x), \quad j = 0, \cdots, M \tag{3.5.67}$$

的稳定性条件, 其中 $r = a\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$.

解　将该差分格式写成 $\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n$ 的形式, 其中 $\boldsymbol{u}^n = (u_0^n, u_1^n, \cdots, u_{M-1}^n)^T$,

$$Q = \begin{bmatrix} 1+r & -r & & & \\ & 1+r & -r & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1+r & -r \\ & & & & 1+r \end{bmatrix}_{M\times M} \tag{3.5.68}$$

因为 Q 是上对角矩阵, 所有特征值为 $1+r$, 于是 $\rho(Q) = |1+r|$, 根据定理 3.5.8, 条件

$$-2 \leqslant r \leqslant 0 \tag{3.5.69}$$

是差分格式 (3.5.65)~(3.5.67) 稳定的必要条件, 因为 Q 不对称, 所以不能应用定理 3.5.8 确定 (3.5.69) 式是否是充分条件. 但根据本节例题 2 的结果我们知道, 作为初值问题的差分格式 (3.5.65) 当且仅当 $-1 \leqslant r$ 是稳定的. 所以条件 (3.5.69) 是不充分的.

□

例 8 讨论差分格式

$$u_j^{n+1} = (1-2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad j = 1, \cdots, M-1 \tag{3.5.70}$$

$$u_M^{n+1} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.5.71}$$

$$u_0^{n+1} = (1-2r)u_0^n + 2ru_1^n \tag{3.5.72}$$

的稳定性和收敛性.

解 该差分格式可以写成 $\boldsymbol{u}^{n+1} = Q\boldsymbol{u}^n$ 的形式, 其中 $\boldsymbol{u}^n = (u_0^n, u_1^n, \cdots, u_{M-1}^n)^T$, Q 是 M 阶方阵, 为

$$Q = \begin{bmatrix} 1-2r & 2r & & & \\ r & 1-2r & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r & 1-2r & r \\ & & & r & 1-2r \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} - r \begin{bmatrix} 2 & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

由第一章定理 1.3.2 得到 Q 的特征值为

$$\lambda_j = 1 - r\left(2 - 2\cos\frac{(2j+1)\pi}{2M}\right) = 1 - 4r\sin^2\frac{(2j+1)\pi}{4\pi}, \quad j = 0, 1, \cdots, M-1$$

由定理 3.5.7 得到差分格式稳定的必要条件是 $r \leqslant \dfrac{1}{2}$. 再注意

$$S^{-1}QS = \begin{bmatrix} 1-2r & \sqrt{2}r & & & \\ \sqrt{2}r & 1-2r & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r & 1-2r & r \\ & & & r & 1-2r \end{bmatrix}_{M\times M}$$

其中 S 是一个对角矩阵, 其对角线元素为 $\sqrt{2},1,\cdots,1$, 故 Q 与一个对称矩阵相似. 因此根据定理 3.5.9, $r\leqslant\dfrac{1}{2}$ 是差分格式 (3.5.70)~ (3.5.72) 稳定 (从而收敛) 的充分必要条件.

□

由上可知, 在对初边值问题用矩阵稳定性方法时, 要确定矩阵特征值界的情况. Geršchgorin 圆盘定理 1.3.3 是确定矩阵特征值界的一个工具.

例 9 对初边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\quad x\in(0,1),t>0 \tag{3.5.73}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t)=h_1[u(0,t)-g_1],\quad t\geqslant 0 \tag{3.5.74}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(1,t)=-h_2[u(1,t)-g_2],\quad t\geqslant 0 \tag{3.5.75}$$

$$u(x,0)=f(x),\quad x\in[0,1] \tag{3.5.76}$$

用差分格式

$$\frac{u_1^n-u_{-1}^n}{2\Delta x}=h_1(u_0^n-u_1) \tag{3.5.77}$$

$$u_j^{n+1}=ru_{j-1}^n+(1-2r)u_j^n+ru_{j+1}^n,\quad j=0,\cdots,M \tag{3.5.78}$$

$$\frac{u_{M+1}^n-u_{M-1}^n}{2\Delta x}=-h_2(u_M^n-u_2) \tag{3.5.79}$$

近似, 其中 $h_1\geqslant 0$, $h_2\geqslant 0$, g_1,g_2 均为常数, $r=\dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}$. 分析差分格式 (3.5.77)~(3.5.79) 的稳定性.

□

解 在差分格式 (3.5.77)~(3.5.79) 中, Neumann 边界条件具有二阶精度. 由方程 (3.5.77) 和 (3.5.79) 分别解得 u_{-1}^n 和 u_{M+1}^n, 然而在方程 (3.5.78) 中分别取 $j=0$ 和 $j=M$, 消去 u_{-1}^n 和 u_{M+1}^n, 所得的差分格式可以写成

$$u_0^{n+1}=(1-2r-2r\Delta xh_1)u_0^n+2ru_1^n+2r\Delta xg_1h_1 \tag{3.5.80}$$

$$u_j^{n+1}=ru_{j-1}^n+(1-2r)u_j^n+ru_{j+1}^n,\quad j=1,\cdots,M-1 \tag{3.5.81}$$

$$u_M^{n+1}=2ru_{M-1}^n+(1-2r-2r\Delta xh_2)u_M^n+2r\Delta xg_2h_2 \tag{3.5.82}$$

写成矩阵形式

$$\boldsymbol{u}^{n+1}=Q\boldsymbol{u}^n+G \tag{3.5.83}$$

其中 $\boldsymbol{u}^{n+1}=(u_0^{n+1},u_1^{n+1},\cdots,u_{M-1}^{n+1},u_M^{n+1})^T$, Q 和 G 分别为

$$Q=\begin{bmatrix}1-2r-2r\Delta xh_1 & 2r & & & \\ r & 1-2r & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r & 1-2r & r \\ & & & 2r & 1-2r-2r\Delta xh_2\end{bmatrix} \tag{3.5.84}$$

$$G=\begin{bmatrix}2r\Delta xg_1h_1\\ 0\\ \vdots\\ 0\\ 2r\Delta xg_2h_2\end{bmatrix} \tag{3.5.85}$$

下面利用 Geršchgorin 圆盘定理 1.3.3 来分析稳定性. 因为 Q 是非对称的, 所以得到的是稳定性的必要条件. 根据 Geršchgorin 圆盘定理 1.3.3, 假如 λ 是 Q 的一个特征值, 则

$$|\lambda-(1-2r-2r\Delta xh_1)|\leqslant 2r \tag{3.5.86}$$

$$|\lambda-(1-2r)|\leqslant 2r \tag{3.5.87}$$

$$|\lambda-(1-2r-2r\Delta xh_2)|\leqslant 2r \tag{3.5.88}$$

令

$$a=1-2r-2r\Delta xh_1,\quad b=1-2r,\quad c=1-2r-2r\Delta xh_2$$

则为保证 Q 的所有特征值都满足 $|\lambda|\leqslant 1$, 由不等式 (3.5.86) ~(3.5.88) 可得

$$-1\leqslant a-2r\leqslant\lambda\leqslant 2r+a\leqslant 1 \tag{3.5.89}$$

$$-1\leqslant b-2r\leqslant\lambda\leqslant 2r+b\leqslant 1 \tag{3.5.90}$$

$$-1\leqslant c-2r\leqslant\lambda\leqslant 2r+c\leqslant 1 \tag{3.5.91}$$

上三式最右端不等式都成立, 由最左端得不等式分别解得

$$r\leqslant\frac{1}{2+\Delta xh_1},\qquad r\leqslant\frac{1}{2},\qquad r\leqslant\frac{1}{2+\Delta xh_2}$$

因此稳定性的必要条件是

$$r\leqslant\min\left\{\frac{1}{2+h_1\Delta x},\frac{1}{2+h_2\Delta x}\right\} \tag{3.5.92}$$

□

如果在例 9 中不考虑边界条件, 则用 von Neumann 方法直接对差分方程 (3.5.78) 分析, 可得稳定性的充要条件为 $r \leqslant \frac{1}{2}$. 显然, 包括非 Dirichlet 边界条件的影响给出一个更有限制的条件. 因此对所有充分小的 Δx, 当 $0 < \Delta x \leqslant \Delta x_0$ 时, 条件简化为

$$r \leqslant \min\left\{\frac{1}{2 + h_1\Delta x_0}, \frac{1}{2 + h_2\Delta x_0}\right\}$$

例 10　分析初边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0,1),\ t > 0 \tag{3.5.93}$$

$$u(x,0) = f(x), \quad x \in [0,1] \tag{3.5.94}$$

$$u(0,t) = \alpha(t), \quad u(1,t) = \beta(t) \tag{3.5.95}$$

得 CN 格式

$$-\frac{r}{2}u_{j-1}^{n+1} + (1+r)u_j^{n+1} - \frac{r}{2}u_{j+1}^{n+1} = \frac{r}{2}u_{j-1}^{n} + (1-r)u_j^{n} + \frac{r}{2}u_{j+1}^{n+1},$$

$$j = 1, \cdots, M-1 \tag{3.5.96}$$

$$u_j^0 = f(j\Delta x), \quad j = 0, \cdots, M \tag{3.5.97}$$

$$u_0^{n+1} = \alpha^{n+1}, \quad u_M^{n+1} = \beta^{n+1}, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{3.5.98}$$

的稳定性. 其中 $r = \frac{a\Delta t}{\Delta x^2}$, $f(0) = \alpha(0)$, $f(1) = \beta(0)$.

解　将 CN 格式写成

$$Q_1\boldsymbol{u}^{n+1} = Q_2\boldsymbol{u}^n \tag{3.5.99}$$

其中 $\boldsymbol{u}^n = (u_1^n, \cdots, u_{M-1}^n)^T$, $\boldsymbol{F}^n = (\frac{r}{2}\alpha^{n+1} + \frac{r}{2}u_0^n, \cdots, \frac{r}{2}\beta_M^{n+1} + \frac{r}{2}u_M^n)^T$,

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 1+r & -\frac{r}{2} & & & \\ -\frac{r}{2} & 1+r & -\frac{r}{2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\frac{r}{2} & 1+r & -\frac{1}{2} \\ & & & -\frac{r}{2} & 1+r \end{bmatrix} \tag{3.5.100}$$

$$Q_2 = \begin{bmatrix} 1-r & \frac{r}{2} & & & \\ \frac{r}{2} & 1-r & \frac{r}{2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{r}{2} & 1-r & \frac{r}{2} \\ & & & \frac{r}{2} & 1-r \end{bmatrix} \tag{3.5.101}$$

方程组 (3.5.99) 可以改写成

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}^{n+1}=(2I-B)\boldsymbol{u}^n+\boldsymbol{F}^n$$

于是

$$\boldsymbol{u}^{n+1}=B^{-1}(2I-B)\boldsymbol{u}^n+B^{-1}\boldsymbol{F}^n\triangleq QU^n+B^{-1}\boldsymbol{F}^n$$

若 λ 是 B 的特征值, 则 $\mu=\dfrac{2}{\lambda}-1$ 是 Q 的特征值, 于是要求 Q 的特征值的绝对值小于或等于 1. 由

$$|\mu|=\left|\frac{2}{\lambda}-1\right|\leqslant 1$$

解得 $\lambda\geqslant 1$.

因为 λ 是 B 的特征值, 根据 Geršchgorin 定理 1.3.3, 有

$$|\lambda-(1+r)|\leqslant\frac{r}{2}\tag{3.5.102}$$

或

$$|\lambda-(1+r)|\leqslant r\tag{3.5.103}$$

显然, λ 满足 (3.5.102) 式必满足 (3.5.103) 式. 因此

$$1\leqslant\lambda<1+2r$$

因此, $\lambda\geqslant 1$ 恒成立. 也即 Q 特征值的绝对值始终小于或等于 1.

注意 B 是对称矩阵, 又

$$\begin{aligned}Q^T&=[B^{-1}(2I-B)]^T=(2I-B)^T(B^{-1})^T=(2I-B)B^{-1}\\&=(2B^{-1}B-B)B^{-1}=B^{-1}(2I-B)=Q\end{aligned}$$

因此 Q 也是对称矩阵. Q 的对称性蕴含稳定性条件是充分必要的, 因此 CN 格式是无条件稳定的.

□

§3.5.3 能量方法

考虑热传导问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\tag{3.5.104}$$

$$u(0,t)=u(1,t)=0,\quad t\geqslant 0\tag{3.5.105}$$

$$u(x,0)=f(x),\quad x\in[0,1]\tag{3.5.106}$$

对方程 (3.5.104) 两边乘以 u 并关于 x 积分, 得

$$\int_0^1 u\frac{\partial u}{\partial t} = \int_0^1 u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}dx \tag{3.5.107}$$

从而

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_0^1 u^2 dx = -2\int_0^1 (\frac{\partial u}{\partial x})^2 dx \leqslant 0 \tag{3.5.108}$$

说明能量 $\int_0^1 u^2 dx$ 关于 t 是不增函数, 于是

$$\int_0^1 u^2(x,t)dx \leqslant \int_0^1 u^2(x,0)dx = \int_0^1 f^2(x)dx \tag{3.5.109}$$

因此当 $t\to\infty$ 时, $\int_0^1 u^2(x,t)dx$ 保持有界.

方程 (3.5.104) 的显式格式是

$$u_j^{n+1} = (1-2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad j = 1,2,\cdots,M-1 \tag{3.5.110}$$

其中 $r = \dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}$. 令差分方程的数值近似解为 u_j^n, 相应的微分方程的精确解为 $u(j\Delta x, n\Delta t)$, 误差 $z_j^n = u_j^n - u(j\Delta x, n\Delta t)$, 则可类似地证明误差能量

$$\sum_{j=1}^{M-1}(z_j^n)^2 = \sum_{j=1}^{M-1}[u_j^n - u(j\Delta x, n\Delta t)]^2 \tag{3.5.111}$$

当 $n\to\infty$ 时保持有界.

易知 z_j^n 满足方程

$$z_j^{n+1} = (1-2r)z_j^n + r(z_{j+1}^n + z_{j-1}^n), \quad j = 1,2,\cdots,M-1 \tag{3.5.112}$$

也即满足

$$z_j^{n+1} - z_j^n = r(z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n), \quad j = 1,2,\cdots,M-1 \tag{3.5.113}$$

在边界上满足条件

$$z_0^n = z_M^n = 0 \tag{3.5.114}$$

在 (3.5.113) 式两端同乘 $(z_j^{n+1} + z_j^n)$, 并对结果从 $j = 1,\cdots,M-1$ 求和, 得

$$\|z^{n+1}\|^2 - \|z^n\|^2 = r\sum_{j=1}^{M-1}(z_j^{n+1} + z_j^n)(z_{j+1}^n + z_{j-1}^n - 2z_j^n) \tag{3.5.115}$$

其中 $||\boldsymbol{z}^n||^2 = \sum\limits_{j=1}^{M-1} z_j^n$. 利用下面的两个恒等式 (证明留给读者)

$$\sum_{j=1}^{M-1} V_j(z_{j-1} - z_j) = \sum_{j=1}^{M-1} z_j(V_{j+1} - V_j), \quad z_0 = V_M = 0 \tag{3.5.116}$$

及

$$\sum_{j=1}^{M-1} V_j(z_{j+1} - z_j) = \sum_{j=1}^{M-1} z_{j+1}(V_j - V_{j+1}) + V_1 z_1, \quad z_0 = V_M = 0 \tag{3.5.117}$$

先将 (3.5.115) 式右端改写成

$$r\sum_{j=1}^{M-1} V_j[(z_{j+1}^n - z_j^n) - (z_j^n - z_{j-1}^n)] \tag{3.5.118}$$

其中 $V_j = z_j^{n+1} + z_j^n$. 将 (3.5.116)~(3.5.117) 代入 (3.5.118) 式中, 并注意到

$$z_0^n = z_0^{n+1} = z_M^n = z_M^{n+1} = 0$$

化简可得

$$||\boldsymbol{z}^{n+1}||^2 - ||\boldsymbol{z}^n||^2 = -r\sum_{j=0}^{M-1}[(z_{j+1}^n - z_j^n)^2 + (z_{j+1}^{n+1} - z_j^{n+1})(z_{j+1}^n - z_j^n)] \tag{3.5.119}$$

若定义

$$E_n = ||\boldsymbol{z}^n||^2 - \frac{1}{2}r\sum_{j=0}^{M-1}(z_{j+1}^n - z_j^n)^2, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.5.120}$$

则

$$E_n \leqslant ||\boldsymbol{z}^n||^2 \tag{3.5.121}$$

$$E_{n+1} - E_n = ||\boldsymbol{z}^{n+1}||^2 - ||\boldsymbol{z}^n||^2 - \frac{r}{2}\sum_{j=0}^{M-1}[(z_{j+1}^{n+1} - z_j^{n+1})^2 - (z_{j+1}^n - z_j^n)^2] \tag{3.5.122}$$

将 (3.5.119) 式代入 (3.5.122) 式中, 得

$$E_{n+1} - E_n = -\frac{r}{2}\sum_{j=0}^{M-1}(z_{j+1}^{n+1} - z_j^{n+1} + z_{j+1}^n - z_j^n)^2 \leqslant 0 \tag{3.5.123}$$

因此 E_n 是 n 的单调下降函数. 下面证明当 $n \to \infty$ 时, $||\boldsymbol{z}^n||^2$ 有界. 对不等式

$$(z_{j+1}^n - z_j^n)^2 \leqslant (z_{j+1}^n - z_j^n)^2 + (z_{j+1}^n + z_j^n)^2 = 2(z_{j+1}^n)^2 + 2(z_j^n)^2 \tag{3.5.124}$$

从 $j=0,1,\cdots,M-1$ 求和, 得

$$\sum_{j=0}^{M-1}(z_{j+1}^n-z_j^n)^2\leqslant 2\sum_{j=0}^{M-1}[(z_{j+1}^n)^2+(z_j^n)^2]=4\sum_{j=0}^{M-1}(z_j^n)^2=4\|\boldsymbol{z}^n\|^2 \tag{3.5.125}$$

由 E_n 的定义, 结合上式, 得到

$$E_n\geqslant(1-2r)\|\boldsymbol{z}^n\|^2$$

若 $0<r<\dfrac{1}{2}$, 则

$$\|\boldsymbol{z}^n\|^2\leqslant\frac{1}{1-2r}E_n$$

又已证得 E_n 是 n 的单调下降函数, 故

$$E_n\leqslant E_{n-1}\leqslant\cdots\leqslant E_0\leqslant\|\boldsymbol{z}^0\|^2$$

所以

$$\|\boldsymbol{z}^n\|^2\leqslant\frac{1}{1-2r}\|\boldsymbol{z}^0\|^2$$

因此若 $0<r<\dfrac{1}{2}$, 则 $\|z^n\|^2$ 有界, 结果稳定.

由于 $\|\boldsymbol{z}\|^2$ 称作能量, 由此这种方法称为能量方法, 能量方法原则上可用于变系数非线性方程.

练 习

1. 确定近似偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{3.5.126}$$

的差分格式

(1) $u^{n+1}=u_j^{n-1}-ru_j^n$.

(2) $u_j^{n+1}=u_j^{n-1}-r\delta_x^0u_j^n+\dfrac{r}{6}\delta_x^0u_j^n$.

(3) $u_j^{n+2}=u_j^{n-2}-\dfrac{2r}{3}(1-\dfrac{1}{6}\delta_x^2)\delta_x^0(2u_j^{n+1}-u_j^n+2u_j^{n-1})$.

的精度. 其中 $r=a\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$, $\delta_x^0u_j^n=u_{j+1}^n-u_{j-1}^n$, $\delta_x^2u_j^n=u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n$.

2. 确定下列差分格式

(1) 显式格式 $u_j^{n+1}=u_j^n-\dfrac{a\Delta t}{2\Delta x}\delta_x^0u_j^n+\dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}\delta_x^2u_j^n$.

(2) 隐式格式 $u_j^{n+1}+\dfrac{a\Delta t}{2\Delta x}\delta_x^0u_j^{n+1}-\dfrac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}\delta_x^2u_j^{n+1}=u_j^n$.

与偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{3.5.127}$$

的相容性. 其中 $\delta_x^0 u_j^n=u_{j+1}^n-u_{j-1}^n$, $\delta_x^2 u_j^n=u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n$.

3. 确定 CN 格式

$$u_j^{n+1}-u_j^n=\frac{\nu\Delta t}{2\Delta x^2}\delta_x^2(u_j^{n+1}+u_j^n)$$

与偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

的相容性, 说明为何对该 CN 格式在点 $(j\Delta x,(n+\frac{1}{2})\Delta t)$ 处考虑相容性是合理的.

4. 证明近似方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

的 Du Fort-Frankel 格式 $(r=\frac{\Delta t}{\Delta x})$

$$u_j^{n+1}=\frac{2r}{1+2r}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)+\frac{1-2r}{1+2r}u_j^{n-1}$$

的截断误差的首项为

$$\frac{\Delta t^2}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}-\frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

若 $\frac{\Delta t}{\Delta x}\to c(\Delta x\to 0)$, 则差分格式近似双曲型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+c^2\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0$$

从而指出要与原方程相容的条件.

5. 确定近似初边值问题

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\quad x\in(0,1),t>0\\
&u(x,0)=f(x),\quad x\in[0,1]\\
&u(1,t)=0,\quad t\geqslant 0\\
&\frac{\partial u(0,t)}{\partial x}=\alpha(t),\quad t\geqslant 0
\end{aligned}$$

的差分格式

$$\begin{aligned}
&u_j^{n+1}+\frac{a\Delta t}{2\Delta x}\delta_x^0 u_j^{n+1}-\frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}\delta_x^2 u_j^{n+1}=u_j^n,\quad j=1,\cdots,M-1\\
&u_j^0=f(j\Delta x),\quad j=1,\cdots,M\\
&u_M^{n+1}=0,\quad n=0,1\cdots\\
&\frac{u_1^{n+1}-u_0^{n+1}}{\Delta x}=\alpha((n+1)\Delta t),\quad n=0,1,2\cdots
\end{aligned}$$

的精度. 其中 $\delta_x^0 u_j^n = u_{j+1}^n - u_{j-1}^n$, $\delta_x^2 u_j^n = u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n$.

6. 证明初边值问题 $(a < 0)$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad x \in (0,1),\ t > 0 \\
&u(x,0) = f(x), \quad x \in [0,1] \\
&u(1,t) = 0, \quad t \geqslant 0
\end{aligned}$$

的差分格式

$$\begin{aligned}
&u_j^{n+1} = (1+r)u_j^n - ru_{j+1}^n, \quad j = 0, \cdots, M-1 \\
&u_M^{n+1} = 0, \quad n = 0, 1, \cdots \\
&u_j^0 = f(j\Delta x), \quad j = 0, \cdots, M
\end{aligned}$$

的稳定性条件是 $|r| \leqslant 1$, 其中 $\Delta x = \dfrac{1}{M}, r = a\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$.

7. 用矩阵法和 Fourier 级数法证明近似偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

的加权 CN 格式 $(r = \dfrac{\Delta t}{\Delta x^2})$

$$u_j^{n+1} - u_j^n = r[\theta(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + (1-\theta)(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)]$$

的稳定性条件是: 当 $0 \leqslant \theta < \dfrac{1}{2}$ 时, $r \leqslant \dfrac{1}{2(1-2\theta)}$; 当 $\dfrac{1}{2} \leqslant \theta \leqslant 1$, 无条件稳定.

8. 对热传导问题

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0,1), t > 0 \\
&u(x,0) = u(1,t) = 0, \quad t \geqslant 0 \\
&u(x,0) = f(x), \quad x \in [0,1]
\end{aligned}$$

用能量法推导 CN 格式

$$\begin{aligned}
&\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\delta_x^2 u_j^{n+1} + \delta_x^2 u_j^n}{2\Delta x}, \quad j = 1, \cdots, M-1 \\
&u_j^0 = f_j, \quad j = 0, 1, \cdots, M \\
&u_0^{n+1} = u_M^{n+1} = 0, \quad n = 0, 1, \cdots
\end{aligned} \tag{3.5.128}$$

的稳定性.

第四章　椭圆型方程

本章讨论椭圆型偏微分方程的数值解法. 椭圆型方程描述定常态物理现象, 例如, 弹性力学中的平衡问题、无粘性流体的无旋流动、位势场 (如静电场和引力场) 问题、热传导中的温度分布问题都可用椭圆型定解问题来描述. 最简单的椭圆型方程是 Laplace 方程, 为

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

其中 $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ 为 Laplace 算子 (也常记为 ∇^2). Poisson 方程

$$\Delta u = -f(x, y)$$

和双调和方程

$$\Delta\Delta u = \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + 2\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} = 0$$

也都是典型的椭圆型方程. 本章先介绍一维二阶两点边值问题差分方程的建立, 然后介绍 Laplace 方程和 Poisson 方程的差分格式, 并分析收敛性.

§4.1 两点边值问题的差分格式

考虑二阶线性常微分方程的两点边值问题

$$-\frac{d}{dx}(p\frac{du}{dx}) + r(\frac{du}{dx}) + qu = f, \quad x \in (a, b) \tag{4.1.1}$$

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta \tag{4.1.2}$$

其中 $p(x) \in C^1[a,b]; r(x), q(x), f(x) \in C[a,b]; p(x) \geqslant p_{\min} > 0$, $q(x) \geqslant 0$, α 和 β 为给定常数. 上述系数条件保证问题 (4.1.1)~(4.1.2) 是适定的.

为简单起见, 将求解区间 $[a,b]$ 用步长 $h = \frac{b-a}{N}$ 剖分成 N 等份, 得到结点

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, \cdots, N$$

下面用直接差分近似和有限体积两种方法来讨论问题的差分格式.

§4.1.1 差分近似

设 $x_i (i = 1, 2, \cdots, N-1)$ 是任一内结点. 在点 x_i 处, 对充分光滑的函数 u, 有

$$(\frac{du}{dx})_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + O(h^2) \tag{4.1.3}$$

$$[\frac{d}{dx}(p\frac{du}{dx})]_i = \frac{1}{h}(p\frac{du}{dx})_{i+\frac{1}{2}} - (p\frac{du}{dx})_{i-\frac{1}{2}} + O(h^2) \tag{4.1.4}$$

又

$$\begin{aligned} p_{i+\frac{1}{2}}\frac{u_{i+1} - u_i}{h} &= (p\frac{du}{dx})_{i+\frac{1}{2}} + \frac{h^2}{24}(p\frac{d^3u}{dx^3})_{i+\frac{1}{2}} + O(h^3) \\ &= (p\frac{du}{dx})_{i+\frac{1}{2}} + \frac{h^2}{24}(p\frac{d^3u}{dx^3})_i + O(h^3) \end{aligned} \tag{4.1.5}$$

$$\begin{aligned} p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i - u_{i-1}}{h} &= (p\frac{du}{dx})_{i-\frac{1}{2}} + \frac{h^2}{24}(p\frac{d^3u}{dx^3})_{i-\frac{1}{2}} + O(h^3) \\ &= (p\frac{du}{dx})_{i-\frac{1}{2}} + \frac{h^2}{24}(p\frac{d^3u}{dx^3})_i + O(h^3) \end{aligned} \tag{4.1.6}$$

其中 $p_{i+\frac{1}{2}} = p(x_{i+\frac{1}{2}})$, $r_i = r(x_i)$, $q_i = q(x_i)$, $f_i = f(x_i)$. 将 (4.1.5)~ (4.1.6) 代入 (4.1.4) 式中, 得

$$\left[\frac{d}{dx}\left(p\frac{du}{dx}\right)\right]_i = \frac{1}{h}\left(p_{i+\frac{1}{2}}\frac{u_{i+1} - u_i}{h} - p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i - u_{i-1}}{h}\right) + O(h^2) \tag{4.1.7}$$

将 (4.1.4)~ (4.1.7) 代入 (4.1.1) 式中, 即得二阶精度的差分方程

$$\begin{gathered} -\frac{1}{h^2}[p_{i+\frac{1}{2}}u_{i+1} - (p_{i+\frac{1}{2}} + p_{i-\frac{1}{2}})u_i + p_{i-\frac{1}{2}}u_{i-1}] + r_i\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + q_i u_i = f_i, \\ i = 1, 2, \cdots, N-1 \end{gathered} \tag{4.1.8}$$

边值条件对应的差分方程为

$$u_0 = \alpha, \quad u_N = \beta \tag{4.1.9}$$

将 (4.1.8) ~ (4.1.9) 式写成如下矩阵形式

$$Au = g \tag{4.1.10}$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & -c_1 & & & \\ -a_2 & b_2 & -c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -a_{N-2} & b_{N-2} & -c_{N-2} \\ & & & -a_{N-1} & b_{N-1} \end{bmatrix} \tag{4.1.11}$$

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{g} = (g_1 + a_1\alpha, g_2, \cdots, g_{N-2}, g_{N-1} + c_{N-1}\beta)^T \\
&\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \cdots, u_{N-1})^T \\
&a_i = 2p_{i-\frac{1}{2}}/h + r_i, \quad i = 1, \cdots, N-1 \\
&b_i = 2(p_{i+\frac{1}{2}} + p_{i-\frac{1}{2}})/h + 2hq_i, \quad i = 1, \cdots, N-1 \\
&c_i = 2p_{i+\frac{1}{2}}/h - r_i, \quad i = 1, \cdots, N-1 \\
&g_i = 2hf_i, \quad i = 1, \cdots, N-1
\end{aligned}$$

可以验证, 当 h 充分小时, 关系式

$$\begin{aligned}
&|b_i| \geqslant |a_i| + |c_i|, \quad i = 2, \cdots, N-2, \\
&|b_1| > |c_1|, \quad |b_{N-1}| > |a_{N-1}|
\end{aligned}$$

成立, 也即矩阵 A 具有严格对角占优性. 实际上后两式显然成立, 对第一式, 注意 h 充分小及 $p(x) \geqslant p_{\min}$, 必有

$$\begin{aligned}
|a_i| + |c_i| &= \left|\frac{2p_{i-\frac{1}{2}}}{h} + r_i\right| + \left|\frac{2p_{i+\frac{1}{2}}}{h} - r_i\right| \\
&= \frac{2(p_{i-\frac{1}{2}} + p_{i+\frac{1}{2}})}{h} \leqslant |b_i|, \quad i = 2, \cdots, N-2
\end{aligned}$$

因此 A 是非奇异矩阵, 差分方程 (4.1.10) 有唯一解.

§4.1.2 有限体积法

有限体积法也称**积分插值法**. 考虑方程 (4.1.1) 的守恒形式 $(r = 0)$, 即

$$-\frac{d}{dx}(p\frac{du}{dx}) + q(x)u = f(x), \quad x \in (a, b) \tag{4.1.12}$$

在 (a, b) 的任意子区间 $[x', x'']$ 上, 对方程 (4.1.12) 积分, 得到

$$(p\frac{du}{dx})_{x'} - (p\frac{du}{dx})_{x''} + \int_{x'}^{x''} q(x)u(x)dx = \int_{x'}^{x''} f(x)dx, \quad \forall [x', x''] \subset (a, b) \tag{4.1.13}$$

为在内结点 $x_i (1 \leqslant i \leqslant N-1)$ 上建立差分方程, 特别地取区间 $[x', x''] = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$, 则 (4.1.13) 式成为

$$(p\frac{du}{dx})_{x_{i-\frac{1}{2}}} - (p\frac{du}{dx})_{x_{i+\frac{1}{2}}} + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q(x)u(x)dx = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x)dx \tag{4.1.14}$$

利用数值积分中的中矩形公式

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q(x)u(x)dx = q_i u_i h + O(h^3) \tag{4.1.15}$$

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x)dx = f_i h + O(h^3) \tag{4.1.16}$$

将 (4.1.5)~(4.1.6) 式与 (4.1.15)~(4.1.16) 式代入 (4.1.14) 式中, 得二阶精度的差分格式

$$-\frac{1}{h}[p_{i+\frac{1}{2}}(u_{i+1}-u_i)-p_{i-\frac{1}{2}}(u_i-u_{i-1})]+hq_iu_i=hf_i,\quad i=1,\cdots,N-1 \tag{4.1.17}$$

该式实质上是 (4.1.8) 式 $r_i=0$ 的特殊情况.

前面我们考虑了第一类边值条件, 对于第二类或第三类边界条件, 如

$$-p(a)(\frac{du}{dx})_a+\alpha_0u(a)=\alpha_1 \tag{4.1.18}$$

$$p(b)(\frac{du}{dx})_b+\beta_0u(b)=\beta_1 \tag{4.1.19}$$

其中 $\alpha_0,\beta_0\geqslant 0$ 为常数, 用积分插值法处理更加简单. 由 (4.1.18) 式得

$$(p\frac{du}{dx})_{x_0=a}=\alpha_0u_0-\alpha_1 \tag{4.1.20}$$

再在 (4.1.13) 式中取积分区间 $[x',x'']=[a,x_{\frac{1}{2}}]$, 得

$$(p\frac{du}{dx})_{x_0}-(p\frac{du}{dx})_{x_{\frac{1}{2}}}+\int_{x_0}^{x_{\frac{1}{2}}} q(x)u(x)dx=\int_{x_0}^{x_{\frac{1}{2}}} f(x)dx \tag{4.1.21}$$

又

$$(p\frac{du}{dx})_{x_{\frac{1}{2}}}=p_{\frac{1}{2}}\frac{u_1-u_0}{h}+O(h^2) \tag{4.1.22}$$

$$\int_{x_0}^{x_{\frac{1}{2}}} q(x)u(x)dx=\frac{h}{2}q_0u_0+O(h^2) \tag{4.1.23}$$

$$\int_{x_0}^{x_{\frac{1}{2}}} f(x)dx=\frac{h}{2}f_0+O(h^2) \tag{4.1.24}$$

将 (4.1.20) 式及 (4.1.22)~(4.1.24) 式代入 (4.1.21) 式中, 得到逼近边界条件 (4.1.18) 式的差分方程

$$-p_{\frac{1}{2}}\frac{u_1-u_0}{h}+(\alpha_0+\frac{h}{2}q_0)u_0=\alpha_1+\frac{h}{2}f_0 \tag{4.1.25}$$

同理, 由边界条件 (4.1.19) 式得

$$(p\frac{du}{dx})_{x_N=b}=\beta_1-\beta_0u_N \tag{4.1.26}$$

在 (4.1.13) 式中取积分区间 $[x', x''] = [x_{N-\frac{1}{2}}, b]$, 得

$$(p\frac{du}{dx})_{x_{N-\frac{1}{2}}} - (p\frac{du}{dx})_{x_N} + \int_{x_{N-\frac{1}{2}}}^{x_N} q(x)u(x)dx = \int_{x_{N-\frac{1}{2}}}^{x_N} f(x)dx \tag{4.1.27}$$

又

$$(p\frac{du}{dx})_{x_{N-\frac{1}{2}}} = p_{N-\frac{1}{2}}\frac{u_N - u_{N-1}}{h} + O(h^2) \tag{4.1.28}$$

$$\int_{x_{N-\frac{1}{2}}}^{x_N} q(x)u(x)dx = \frac{h}{2}q_N u_N + O(h^2) \tag{4.1.29}$$

$$\int_{x_{N-\frac{1}{2}}}^{x_N} f(x)dx = \frac{h}{2}f_N + O(h^2) \tag{4.1.30}$$

将 (4.1.26) 式及 (4.1.28)~(4.1.30) 式代人 (4.1.27) 式中, 得边界条件 (4.1.19) 式的差分方程

$$p_{N-\frac{1}{2}}\frac{u_N - u_{N-1}}{h} + (\beta_0 + \frac{h}{2}q_N)u_N = \beta_1 + \frac{h}{2}f_N \tag{4.1.31}$$

由 (4.1.17)式、(4.1.25) 式和 (4.1.31) 式可构成一个完整求解的差分方程

$$-p_{i-\frac{1}{2}}u_{i-1} + (p_{i-\frac{1}{2}} + p_{i+\frac{1}{2}} + h^2 q_i)u_i - p_{i+\frac{1}{2}}u_{i+1} = h^2 f_i, \quad i = 1, \cdots, N-1 \tag{4.1.32}$$

$$(p_{\frac{1}{2}} + h\alpha_0 + \frac{h^2}{2}q_0)u_0 - p_{\frac{1}{2}}u_1 = h\alpha_1 + \frac{h^2}{2}f_0 \tag{4.1.33}$$

$$-p_{N-\frac{1}{2}}u_{N-1} + (p_{N-\frac{1}{2}} + h\beta_0 + \frac{h^2}{2}q_N)u_N = h\beta_1 + \frac{h^2}{2}f_N \tag{4.1.34}$$

写成矩阵形式为

$$A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & & & & \\ b_0 & a_1 & b_1 & & & \\ & b_1 & a_2 & b_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{N-2} & a_{N-1} & b_{N-1} \\ & & & & b_{N-1} & a_N \end{bmatrix}$$

其中

$$\begin{aligned}
&a_0 = p_{\frac{1}{2}} + h\alpha_0 + \tfrac{h^2}{2}q_0 \\
&a_N = -p_{N-\frac{1}{2}} + h\beta_0 + \tfrac{h^2}{2}q_N \\
&a_i = p_{i-\frac{1}{2}} + p_{i+\frac{1}{2}} + h^2 q_i, \quad i = 1, \cdots, N-1 \\
&b_i = -p_{i+\frac{1}{2}}, \quad i = 0, \cdots, N-1 \\
&\boldsymbol{f} = (h\alpha_1 + \tfrac{h^2}{2}f_0, h^2 f_1, \cdots, h^2 f_{N-1}, h\beta_1 + \tfrac{h^2}{2}f_N)^T \\
&\boldsymbol{u} = (u_0, u_1, \cdots, u_N)^T
\end{aligned}$$

可以看到，所得的系数矩阵 A 是对称的，而且严格对角占优，因此 A 非奇异，方程有唯一解. 如果直接用前面导数近似的方法去逼近第二类或第三类边界条件，或者引进虚结点的方法 (后面讨论) 近似导数，则破坏系数矩阵的对称性.

§4.2 基于变分原理的差分格式

本节讨论基于变分原理的差分格式，其基本思想是首先将偏微分方程问题转化为一个泛函的极值问题或变分问题，然后对转化后的问题进行差分离散，导出差分格式. 在推导差分格式之前，我们先介绍下面两个定理，即 Lax-Milgram 引理和迹定理.

考虑如下变分方程. 设 V 是 Hilbert 空间，$A:(u,v)\in V\times V\to A(u,v)\in \mathbf{R}$ 是一个双线性泛函，$F(v)$ 是连续线性泛函，求 $u\in V$，使得

$$A(u,v)=F(v),\quad \forall v\in V \tag{4.2.1}$$

该方程解的存在性和唯一性由 Lax-Milgram 引理给出.

定理 4.2.1 (Lax-Milgram 引理)设 V 是Hilbert空间，$\|\cdot\|$ 是其范数，$A(u,v):V\times V\to\mathbf{R}$ 是双线性泛函，$F(v):V\to\mathbf{R}$ 是连续线性泛函. 若 $A(\cdot,\cdot)$ 满足条件

(1) 连续性，即 $\exists\gamma>0$，使得

$$|A(w,v)|\leqslant\gamma\|w\|\cdot\|v\|,\quad \forall w,v\in V \tag{4.2.2}$$

(2) 强制性，即 $\exists\alpha>0$，使得

$$A(v,v)\geqslant\alpha\|v\|^2,\quad \forall v\in V \tag{4.2.3}$$

则方程(4.2.1)存在唯一解 u，且

$$\|u\|\leqslant\frac{1}{\alpha}\|F\|_{V^*} \tag{4.2.4}$$

其中 V^* 为 V 的对偶空间.

证明 根据 Riesz 表示定理，有

$$F(v)=(GF,v)_V,\quad \forall v\in V \tag{4.2.5}$$

且对每一固定的 $w\in V$

$$A(w,v)=(\tilde{A}w,v)_V,\quad \forall v\in V \tag{4.2.6}$$

其中 $(\cdot,\cdot)_V$ 是 V 上的内积. $G:\ V^*\to V$ 是双射，且为等距算子，因为

$$\|GF\|=\sup_{v\in V,v\neq 0}\frac{|(GF,v)_V|}{\|v\|}=\sup_{v\in V,v\neq 0}\frac{|F(v)|}{\|v\|}=\|F\|_{V^*} \tag{4.2.7}$$

$\tilde{A}: V \to V$ 是连续算子, 因为

$$||\tilde{A}w|| = \sup_{v\in V, v\neq 0} \frac{\left|(\tilde{A}w, v)_V\right|}{||v||} = \sup_{v\in V, v\neq 0} \frac{|A(w,v)|}{||v||} \leqslant \gamma||w|| \tag{4.2.8}$$

因此求解变分方程 (4.2.1) 等价于:

求 $u \in V$, 使得对每个 $F \in V^*$

$$\tilde{A}u = GF \tag{4.2.9}$$

这只要证明 $\tilde{A}$ 是双射即可.

首先证明 $\tilde{A}$ 是单射或一对一的. 因

$$||v||^2 \leqslant \frac{1}{\alpha}(\tilde{A}v, v)_V \leqslant \frac{1}{\alpha}||\tilde{A}v||\,||v||, \quad \forall v \in V \tag{4.2.10}$$

所以

$$||v|| \leqslant \frac{1}{\alpha}||\tilde{A}v|| \tag{4.2.11}$$

该式蕴含若 $\tilde{A}v_1 = \tilde{A}v_2$ 必有 $v_1 = v_2$(或 $v_1 \neq v_2$ 必有 $Av_1 \neq Av_2$). 因此 $\tilde{A}$ 是单射. 唯一性得证.

其次证明 $\tilde{A}$ 为满射. 现证 $\tilde{A}$ 的值域 $\mathcal{R}(\tilde{A})$ 是闭的且 $\mathcal{R}(\tilde{A})^\perp = \{0\}$, 从而 $\mathcal{R}(\tilde{A}) = V$ 也即 $\tilde{A}$ 是满射. 假设 $\tilde{A}v_n \to w \in V$, 由 (4.2.11) 式, 得

$$||v_n - v_m|| \leqslant \frac{1}{\alpha}||\tilde{A}v_n - \tilde{A}v_m||$$

因此 v_n 是 Cauchy 序列. 令 $v = \lim_{n\to\infty} v_n$. 因为 $\tilde{A}$ 连续, 所以 $\tilde{A}v_n \to \tilde{A}v = w$, 因此 $\mathcal{R}(\tilde{A})$ 闭. 再取 $z \in \mathcal{R}(A)^\perp$, 则由强制性条件知

$$0 = (\tilde{A}z, z)_V = A(z,z) \geqslant \alpha||z||^2$$

即 $z = 0$. 因此 $\tilde{A}$ 是满射.

由上可知, 对每个 $F \in V^*$, (4.2.9) 式存在唯一解. 在 (4.2.1) 式中取 $v = u$, 由 $A(\cdot,\cdot)$ 得强制性和 $F(\cdot)$ 的有界性, 得到

$$||u||^2 \leqslant \frac{1}{\alpha}A(u,u) = \frac{1}{\alpha}F(u) \leqslant \frac{1}{\alpha}||F||_{V^*}||u||$$

即

$$||u|| \leqslant \frac{1}{\alpha}||F||_{V^*}$$

得证.

□

推论 4.2.1 若定理 4.2.1 中的双线性形式 $A(\cdot,\cdot)$ 对称, 即

$$A(w,v)=A(v,w),\quad \forall w,v\in V \tag{4.2.12}$$

则变分方程 (4.2.1) 与下述变分问题等价:

求 $u\in V$, 使得

$$J(u)=\min_{v\in V}J(v) \tag{4.2.13}$$

其中

$$J(v)\triangleq\frac{1}{2}A(v,v)-F(v) \tag{4.2.14}$$

是二次泛函.

证明 先证变分方程 (4.2.13) 的解必是变分问题的解, 任取 $v\in V$, 利用 $A(\cdot,\cdot)$ 的对称性, 计算

$$\begin{aligned}J(u+v)-J(u)&=\frac{1}{2}A(u+v,u+v)-F(u+v)-[\frac{1}{2}A(u,u)-F(u)]\\&=A(u,v)-F(v)+\frac{1}{2}A(v,v)\\&=\frac{1}{2}A(v,v)\geqslant\frac{\alpha}{2}||v||^2\geqslant 0,\quad \forall v\in V\end{aligned}$$

即

$$J(u+v)\geqslant J(u)$$

其中当 $v=0$ 时等号成立. 因此

$$J(u)=\min_{v\in V}J(v)$$

其次, 若 $u\in V$ 是变分问题 (4.2.13) 的解, $\forall v\in V$ 和实数 λ, 则

$$\begin{aligned}J(u+\lambda v)&=\frac{1}{2}A(u,u)+\lambda A(u,v)+\frac{1}{2}\lambda^2A(v,v)-F(u)-\lambda F(v)\\&\geqslant J(u)=\frac{1}{2}A(u,u)-F(u)\end{aligned}$$

即

$$\frac{1}{2}\lambda^2A(v,v)+\lambda[A(u,v)-F(v)]\geqslant 0$$

由于对任意 v 和 λ 都成立, 故必有 $A(u,v)=F(v)$

□

定理 4.2.2 (迹定理) 设 Ω 是一具有Lipschitz连续边界 $\partial\omega$ 的有界开集, $s>\dfrac{1}{2}$, 则

(1) 存在唯一的线性连续映射 $\gamma_0:H^s(\Omega)\longrightarrow H^{s-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ 使得对每个 $v\in H^s(\Omega)\cap C^0(\bar{\Omega})$, 有 $\gamma_0v=v|_{\partial\Omega}$.

(2) 存在一个线性连续映射 $\mathcal{R}_0 : H^{s-\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \longrightarrow H^s\Omega$, 使得对每个 $\varphi \in H^{s-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$, 有 $\gamma_0\mathcal{R}_0\varphi = \varphi$.

该定理的证明可见 Adams 的《Sobolev Space》.

§4.2.1 基于 Riesz 法的差分近似

一切自共轭微分方程问题都可以归结为求一个函数使某泛函达到极小值的等价问题. 例如, 两点边值问题

$$-\frac{d}{dx}(p(x)\frac{du}{dx}) + q(x)u = f(x), \quad x \in (0,1) \tag{4.2.15}$$

$$p(0)(\frac{\partial u}{\partial x})_{x=0} = \alpha_0 u(0) - \alpha_1 \tag{4.2.16}$$

$$-p(1)(\frac{\partial u}{\partial x})_{x=1} = \beta_0 u(1) - \beta_1 \tag{4.2.17}$$

其中 $p(x) \in C^1[0,1]$, $q(x), f(x) \in C[0,1]$, $p(x) \geqslant p_{\min} > 0$, $q(x) \geqslant 0$, $\alpha_1 \geqslant 0$, $\beta_1 \geqslant 0$.

若令

$$a(u,v) = \int_0^1 [p(x)u^{'}(x)v^{'}(x) + q(x)u(x)v(x)]dx + \alpha_0 u(0)v(0) + \beta_0 u(1)v(1) \tag{4.2.18}$$

$$F(v) = \int_0^1 f(x)v(x)dx + \alpha_1 v(0) + \beta_1 v(0) \tag{4.2.19}$$

则易知边值问题 (4.2.15)~(4.2.17) 对应的变分方程为:

求 $u \in H^1(0,1)$, 使得

$$a(u,v) = F(v), \quad \forall v \in H^1(0,1) \tag{4.2.20}$$

由于 $a(u,v)$ 的对称性, 可作二次泛函

$$J(u) = \frac{1}{2}a(u,v) - F(u) \tag{4.2.21}$$

因此也等价于下列二次泛函的极小值问题, 即

求 $u \in H^1(0,1)$, 使得

$$J(u) = \min_{v \in H^1(0,1)} J(v) \tag{4.2.22}$$

利用 Lax-Milgram 引理 4.2.1, 若 $a(u,v)$ 满足有界性强制性及 $F(u)$ 有界, 就知泛函 $J(u)$ 的极小值存在唯一.

注意到 $p(x), q(x)$ 的条件, 由 Schwartz 不等式和迹定理 4.2.2, 可得

$$\begin{aligned}|a(u,v)| &\leqslant \max\{||p||_{C[0,1]}, ||q||_{C[0,1]}\}||u||_{H^1(0,1)}||v||_{H^1(0,1)} \\ &\quad + \max\{\alpha_0, \beta_0\}||u||_{H^1(0,1)}||v||_{H^1(0,1)} \\ &\leqslant C||u||_{H^1(0,1)}||v||_{H^1(0,1)}\end{aligned} \tag{4.2.23}$$

其中 $C=\max\{||p||_{C[0,1]},||q||_{C[0,1]},\alpha_0,\beta_0\}$. 因此 $a(u,v)$ 有界.

类似地, 注意 $p(x)>0,\ q(x)\geqslant 0,\ \alpha_0,\beta_0$ 非负, 可得

$$\begin{aligned}a(u,u)&=\int_0^1[p(u')^2+qu^2]dx+\alpha_0u^2(0)+\beta_0u^2(1)\\&\geqslant\min\{p(x),q(x)\}||u||^2_{H^1(0,1)}=C||u||^2_{H^1(0,1)}\end{aligned}\tag{4.2.24}$$

其中 $C=\min\limits_{x\in[0,1]}\{p(x),q(x)\}$.

同理利用迹定理 4.2.2, 并注意 $f(x)\in C[0,1]$, 对 $F(u)$ 有

$$|F(u)|\leqslant||f||_{C[0,1]}||u||_{H^1(0,1)}+\max\{\alpha_1,\beta_1\}||u||_{H^1(0,1)}\leqslant C||u||_{H^1(0,1)}\tag{4.2.25}$$

其中 $C=\max\{||f||_{C[0,1]},\alpha_1,\beta_1\}$

注意 $a(u,v)$ 对称, 由 (4.2.23)~(4.2.25) 式知, 满足 Lax-Milgram 引理的推论 4.2.1 的条件, 因此, (4.2.20) 或变分问题 (4.2.21)~(4.2.22) 在 $H^1(0,1)$ 中有唯一解, 且即为原边值问题 (4.2.15)~(4.2.17) 的解.

下面用 Riesz 方法近似求出泛函 $J(u)$ 取极小值的近似解. 设 $H^1(0,1)$ 是泛函 $J(u)$ 取极小值的空间, 我们构造有限维子空间序列空间 $V_h\subset H^1(0,1)$ 来取代 $H^1(0,1)$, 从而在 V_h 中求泛函的极小值. 假设 $\dim(V_h)=N+1$, $\varphi_i^{(N+1)}(i=0,\cdots,N)$ 是 V_h 的基, 则对任意的元素 $u_h\in V_h$, 有

$$u_h=\sum_{i=0}^{N}c_i\varphi_i^{(N+1)}\tag{4.2.26}$$

将该式近似 u 并代入泛函 $J(u)$ 中, 得到 $N+1$ 个变量 $c_0,c_1,\cdots,c_N$ 的函数. 该函数达到极值时系数 c_i 应满足方程组

$$\frac{\partial J}{\partial c_i}=0,\quad i=0,1,\cdots,N\tag{4.2.27}$$

因此解得系数 c_i, 再代入 (4.2.26) 式中即得近似解. 为使近似解 u_h 当 $h\to 0$ 时收敛于精确解 u, 必须使选取的 $\{\varphi_0^{(N+1)},\cdots,\varphi_N^{(N+1)}\}$ 张成的有限维子空间 V_h 在某种意义下逼近空间 $H^1(0,1)$.

将 (4.2.26) 式代入 (4.2.19) 式中, 得

$$\begin{aligned}J(u_h)=&\frac{1}{2}a\left(\sum_{i=0}^{N}c_i\varphi_i^{(N+1)},\sum_{i=0}^{N}c_i\varphi_i^{(N+1)}\right)-\int_0^1 f\sum_{i=0}^{N}c_i\varphi_i^{(N+1)}dx\\&-\alpha_1\sum_{i=0}^{N}c_i\varphi_i^{(N+1)}(0)-\beta_1\sum_{i=0}^{N}c_i\varphi_i^{(N+1)}(1)\\=&\frac{1}{2}\sum_{i,j=0}^{N}a_{i,j}c_ic_j-\sum_{i=0}^{N}b_ic_i\end{aligned}\tag{4.2.28}$$

其中

$$a_{i,j}=a_{j,i}=a(\varphi_i^{(N+1)},\varphi_j^{(N+1)}) \tag{4.2.29}$$

$$b_i=\int_0^1 f(x)\varphi_i^{(N+1)}(x)dx+\alpha_1\varphi_i^{(N+1)}(0)+\beta_1\varphi_i^{(N+1)}(1) \tag{4.2.30}$$

由 $\dfrac{\partial J(u_h)}{\partial c_i}=0$ 得下列关于 c_i 的方程组

$$\sum_{j=0}^{N}a_{i,j}c_j-b_i=0,\quad i=0,1,\cdots,N \tag{4.2.31}$$

取步长 $h=\frac{1}{N}$, 对 $[0,1]$ 作等步长剖分, 得结点 $x_i=ih, i=0,1,\cdots,N$. 如果将函数 $\varphi_i^{(N+1)}(x)$ 取成只有当 $|x-x_i|\leqslant h(x\in[0,1])$ 时不等于零, 则它们将在 (4.2.18) 式的意义下, 当 $|i-j|\geqslant 2$ 时正交.$H^1(0,1)$ 中满足这种要求的最简单的函数是

$$\varphi_i^{(N+1)}(x)=\begin{cases}0,\quad 0\leqslant x\leqslant x_{i-1},\quad x_{i+1}\leqslant x\leqslant 1\\(x-x_{i-1})/h,\quad x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i\\(x_{i+1}-x)/h,\quad x_i\leqslant x\leqslant x_{i+1}\end{cases} \tag{4.2.32}$$

$$\varphi_0^{(N+1)}(x)=\begin{cases}(h-x)/h,\quad 0\leqslant x\leqslant h\\0,\quad h\leqslant x\leqslant 1\end{cases} \tag{4.2.33}$$

$$\varphi_N^{(N+1)}(x)=\begin{cases}(x-1+h)/h,\quad 1-h\leqslant x\leqslant 1\\0,\quad 0\leqslant x\leqslant 1-h\end{cases} \tag{4.2.34}$$

该函数的图形见图 4.1.

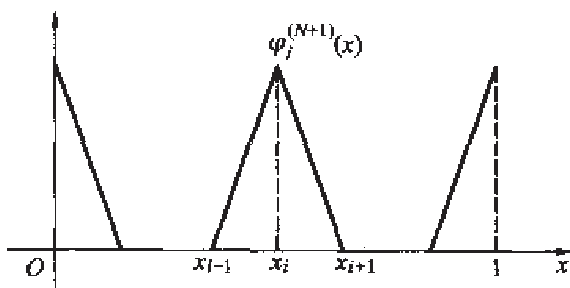


图 4.1　基函数示意图

如果基函数取作 (4.2.32)~(4.2.34)式, 而展开式 (4.2.26) 中的参数 c_i 取作结点上的函数值 u_i, 则子空间 V_h 将由分段线性连续函数组成. 这些子空间在 $h\to 0$ 时能充分逼近 $H^1(0,1)$. 对应的方程组 (4.2.31) 具有如下形式

$$\begin{aligned}&a_{i,i-1}u_{i-1}+a_{i,i}u_i+a_{i,i+1}u_{i+1}-b_i=0,\quad i=1,\cdots,N-1\\&a_{0,0}u_0+a_{0,1}u_1-b_0=0\\&a_{N,N-1}u_{N-1}+a_{N,N}u_N-b_N=0\end{aligned} \tag{4.2.35}$$

现在来计算 (4.2.35) 中的系数 $a_{i,j}$ 式和 b_i, 由 (4.2.18) 和 (4.2.29) 式得

$$
\begin{aligned}
a_{i,i} &= h^{-2}\left[\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p(x)dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} q(x)(x-x_{i-1})^2dx + \int_{x_{i+1}}^{x_i} q(x)(x-x_{i+1})^2dx\right], \\
&\quad i=1,\cdots,N-1 \\
a_{0,0} &= h^{-2}\left[\int_0^h \alpha(x)dx + \int_0^h q(x)(x-h)^2dx\right] + \alpha_0 \\
a_{N,N} &= h^{-2}\left[\int_{1-h}^1 p(x)dx + \int_{1-h}^1 q(x)(x-1+h)^2dx\right] + \beta_0 \\
a_{i,i+1} &= a_{i+1,i} = h^{-2}\left[-\int_{x_i}^{x_{i+1}} p(x)dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} q(x)(x_{i+1}-x)(x-x_i)dx\right], \\
&\quad i=1,\cdots,N-1 \\
b_i &= h^{-1}\left[\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)(x-x_{i-1})dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)(x_{i+1}-x)dx\right], \quad i=1,\cdots,N-1 \\
b_0 &= h^{-1}\int_0^h f(x)(h-x)dx + \alpha_0 \\
b_N &= h^{-1}\int_{1-h}^1 f(x)(x-1+h)dx + \beta_1
\end{aligned}
\tag{4.2.36}
$$

由于采用的基函数是分段线性连续函数, 而线性插值误差是 $O(h^2)$ 阶, 因此差分问题 (4.2.28) 逼近问题 (4.2.15) ~(4.2.17) 的误差是 $O(h^2)$.

上面通过寻找基函数求解泛函极小值来得到近似解, 我们还可以直接对泛函本身进行差分逼近, 即用求积公式近似泛函表达式中的积分, 导数用差商近似. 例如对泛函 (4.2.21), 即

$$
J(u) = \frac{1}{2}a(u,u) - F(u)
$$

其中

$$
\begin{aligned}
a(u,u) &= \int_0^1 [p(x)(u'(x))^2 + q(x)u^2(x)]dx + \alpha_0 u(0)v(0) + \beta(0)u(1)v(1) \\
F(u) &= \int_0^1 f(x)u(x)dx + \alpha_1 u(0) + \beta_1 u(0)
\end{aligned}
$$

第一个积分用中矩形公式代替, 后两个积分用梯形公式代替, 在 $x_i - \dfrac{h}{2}$ 处的导数值

用中心差分公式代替, 则可得

$$J(u_h)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}p_{i-\frac{h}{2}}(\frac{u_i-u_{i-1}}{h})^2h+\frac{h}{4}[q_0u_0^2+q_Nu_N^2-2f_0u_0-2f_Nu_N]$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N-1}[q_iu_i^2-2f_iu_i]h+\frac{\alpha_0}{2}u_0^2+\frac{\beta_0}{2}u_N^2-\alpha_1u_0-\beta_1u_N \tag{4.2.37}$$

其中 $q_0=q(0)$, $q_N=q(1)$, $f_0=f(0)$, $f_N=f(1)$. 令 $\frac{\partial J(u_h)}{\partial u_i}=0$, $i=1,2\cdots,N-1$, 得到方程

$$-p_{i+\frac{1}{2}}\frac{u_{i+1}-u_i}{h}+p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i-u_{i-1}}{h}+hq_iu_i-hf_i=0,\quad i=1,2,\cdots,N-1 \tag{4.2.38}$$

当 $i=0,N$ 时, 有

$$-p_{\frac{1}{2}}\frac{u_1-u_0}{h}+\frac{h}{2}q_0u_0-\frac{h}{2}f_0+\alpha_0u_0-\alpha_1=0 \tag{4.2.39}$$

$$p_{N-\frac{1}{2}}\frac{u_N-u_{N-1}}{h}+\frac{h}{2}q_Nu_N-\frac{h}{2}f_N+\beta_0u_N-\beta_1=0 \tag{4.2.40}$$

将 (4.2.38)~(4.2.40) 式分别改写成

$$-\frac{1}{h}\left[p_{i+\frac{1}{2}}\frac{u_{i+1}-u_i}{h}-p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i-u_{i-1}}{h}\right]+q_iu_i=f_i,\quad i=1,2,\cdots,N-1 \tag{4.2.41}$$

$$p_{\frac{1}{2}}\frac{u_1-u_0}{h}=\left(\alpha_0+\frac{h}{2}q_0\right)u_0-\left(\alpha_1+\frac{h}{2}f_0\right) \tag{4.2.42}$$

$$-p_{N-\frac{1}{2}}\frac{u_N-u_{N-1}}{h}=\left(\beta_0+\frac{h}{2}q_N\right)u_N-\left(\beta_1+\frac{h}{2}f_N\right) \tag{4.2.43}$$

(4.2.41)~(4.2.43) 式即为原问题的差分格式. 这与前面积分插值法所得的结果 (4.1.32)~(4.1.34) 式完全相同, 所以方程与边值条件都具有 $O(h^2)$ 解精度.

上面直接近似泛函而不是选取基函数的方法对处理高阶方程更为简单, 例如考虑 问题

$$\frac{\partial^4u}{\partial x^4}+qu(x)=f(x),\quad x\in(0,1) \tag{4.2.44}$$

$$\left(\frac{\partial^2u}{\partial x^2}\right)_{x=0}=\left(\frac{\partial^3u}{\partial x^3}\right)_{x=0}=\left(\frac{\partial^2u}{\partial x^2}\right)_{x=1}=\left(\frac{\partial^3u}{\partial x^3}\right)_{x=1}=0 \tag{4.2.45}$$

其中 q 为常数, 不难推知该问题等价于寻找函数 $u(x)$, 使得泛函

$$J(u)=\int_0^1\left(\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+qu^2\right)dx-2\int_0^1u(x)f(x)dx \tag{4.2.46}$$

取极小值. 我们用梯形求积公式来近似该泛函中的积分, 注意利用边界条件 $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{x=0} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{x=1}$, 可得

$$J(u_h) = \sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{u_{i-1}-2u_i+u_{i+1}}{h^2}\right)^2 h + \sum_{i=1}^{N-1}(qu_i^2 - 2f_iu_i)h$$
$$+\frac{h}{2}[qu_0^2 + qu_N^2 - 2f_0u_0 - 2f_Nu_N]$$

令 $\frac{\partial J(u_h)}{\partial u_i} = 0, i = 2, \cdots, N-2$, 得

$$\frac{2}{h^3}(u_{i-2}-2u_{i-1}+u_i)-\frac{4}{h^3}(u_{i-1}-2u_i+u_{i+1})+\frac{2}{h^3}(u_i-2u_{i+1}+u_{i+2})+2hqu_i-2hf_i=0 \tag{4.2.47}$$

利用边界条件, 可得

当 $i=0$ 时

$$\frac{2}{h^3}(u_0-2u_1+u_2)+hqu_0-hf_0=0 \tag{4.2.48}$$

当 $i=1$ 时

$$-\frac{4}{h^3}(u_0-2u_1+u_2)+\frac{2}{h^3}(u_1-2u_2+u_3)+2(qu_1-2f_1)=0 \tag{4.2.49}$$

当 $i=N-1$ 时

$$\frac{2}{h^3}(u_{N-3}-2u_N+u_{N-1})-\frac{4}{h^3}(u_{N-2}-2u_{N-1}+u_N)+2hqu_{N-1}-2hf_{N-1}=0 \tag{4.2.50}$$

当 $i=N$ 时

$$\frac{2}{h^3}(u_{N-2}-2u_{N-1}+u_N)+hqu_N-hf_N=0 \tag{4.2.51}$$

于是问题 (4.2.44)~(4.2.45) 的差分格式为

$$\begin{cases} u_{i-2}-4u_{i-1}+(6+h^4q)u_i-4u_{i+1}+u_{i+2}=h^4f_i, \quad i=2,\cdots,N-2 \\ (2+h^4q)u_0-4u_1+2u_2=h^4f_0 \\ 2u_0-(5+h^3q)u_1+4u_2-u_3=-2h^3f_1 \\ u_{N-3}-2u_{N-2}+(5+h^4q)u_{N-1}-4u_N=h^4f_{N-1} \\ 2u_{N-2}-4u_{N-1}+(2+h^4q)u_N=h^4f_N \end{cases} \tag{4.2.52}$$

该问题是 $O(h^2)$ 精度的差分近似.

§4.2.2 基于 Galërkin 方法的差分近似

Galërkin 方法比前面的 Riesz 方法范围更广，当方程为非自共轭时，可采用 Galërkin 方法. 考虑问题

$$
\begin{aligned}
&-\frac{d}{dx}(p(x)\frac{du}{dx})+r(x)\frac{du}{dx}+q(x)u=f(x), \quad x\in(0,1)\\
&p(0)(\frac{\partial u}{\partial x})_{x=0}=\alpha_0 u(0)-\alpha_1\\
&-p(1)(\frac{\partial u}{\partial x})_{x=1}=\beta_0 u(1)-\beta_1
\end{aligned}
\tag{4.2.53}
$$

当 $p(x)\in C^1[0,1]$ 且 $p(x)\geqslant p_{\min}>0$; $q(x)\in C[0,1]$, $q(x)\geqslant 0$; $r(x),f(x)\in C[0,1]$; α_0, α_1,β_0, α_1 均为常数，且 α_0,β_0 非负时，问题 (4.2.53) 有唯一解，$u(x)\in C^2[0,1]$. 当 $p(x)\in C[0,1]$, $p(x)>0$; $r(x),q(x),f(x)\in L_2[0,1]$ 且 $q(x),\alpha_0,\beta_0$ 非负时，上式有唯一解 $u(x)\in H^1(0,1)$.

同 Riesz 法一样, Galërkin 方法也是在有限维子空间序列 V_h 中求解问题 (4.2.1). 假定 $h\to 0$ 时, V_h 能完全逼近 V, 即假设对所有 $v\in V$, 有

$$\inf_{v_h\in V_h}||v-v_h||\to 0, \quad h\to 0$$

则求解变分方程问题:

寻找 $u\in V$, 使得

$$A(u,v)=F(v), \quad \forall v\in V \tag{4.2.54}$$

成为求解问题:

寻找 $u_h\in V_h$ 使得

$$A(u_h,v_h)=F(v_h), \quad \forall v_h\in V_h \tag{4.2.55}$$

定理 4.2.3 (Céa 引理) *在 Lax-Milgram 4.2.1 的条件下, 问题 (4.2.55) 有唯一解 u_h, 且满足*

$$||u_h||\leqslant\frac{||F||_{V^*}}{\alpha} \tag{4.2.56}$$

而且若 u 满足问题 (4.2.54) 的解, 则

$$||u-u_h||\leqslant\frac{\gamma}{\alpha}\inf_{v_h\in V_h}||u-v_h|| \tag{4.2.57}$$

因此 u_h 收敛到 u.

证明 因为 $V_h\subset V$, 所以问题 (4.2.55) 满足 Lax-Milgram 引理 4.2.1 的条件, 故存在唯一的一个解 u_h, 而且, 取 $v_h=u_h$, 再由强制性条件得

$$\alpha||u_h||^2\leqslant A(u_h,u_h)=F(u_h)\leqslant||F||_{V^*}||u_h||$$

即

$$\|u_h\| \leqslant \frac{\|F\|_{V^*}}{\alpha}$$

由于 $\|F\|_{V^*}$ 与 α 均与网格步长 h 无关, 由该式可知解 u_h 稳定.

设 $v \in V_h$, 则 (4.2.54) 式减 (4.2.55) 式, 得

$$A(u-u_h, v_h) = 0, \quad \forall v_h \in V_h$$

再根据 $A(\cdot,\cdot)$ 的连续性和强制性, 并在上式中取 $v_h = w_h - u_h$, $w_h \in V_h$, 则有

$$\begin{aligned}\alpha\|u-u_h\|^2 &\leqslant A(u-u_h, u-u_h) = A(u-u_h, u-w_h)\\ &\leqslant \gamma\|u-u_h\|\cdot\|u-w_h\|, \quad \forall w_h \in V_h\end{aligned}$$

即

$$\|u-u_h\| \leqslant \frac{\gamma}{\alpha}\inf_{v_h\in V_h}\|u-v_h\|$$

因此 u_h 收敛到 u.

□

下面求问题 (4.2.53) 的解 $u \in H^1(0,1)$. 易知, 该问题的变分方程满足

$$\begin{aligned}&\int_0^1 [p(x)u'(x)v'(x) + r(x)u'(x)v(x) + q(x)u(x)v(x) - f(x)v(x)]dx\\ &+\beta_0 u(1)v(1) + \alpha_0 u(0)v(0) - \beta_1 v(1) - \alpha_1 v(0) = 0 \end{aligned} \tag{4.2.58}$$

假定 V_h 是空间 $H^1(0,1)$ 的有限维子空间序列, 我们寻求近似解 $u_h(x) \in V_h$, 使之对一切函数 $v_h(x) \in V_h$ 满足等式 (4.2.58). 现设 V_h 是前面引进的分段线性连续函数空间, $\varphi_i^{(N+1)}(x)(i=0,1,\cdots,N)$ 是基函数, 则寻求形如

$$u_h = \sum_{j=0}^{N} u_j \varphi_j^{(N+1)} \tag{4.2.59}$$

的近似解. 在 (4.2.58) 式中令 $v(x) = \varphi_i^{(N+1)}(x)$, 并将 (4.2.59) 式代入 (4.2.58) 式中, 得

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N}\Big\{\int_0^1 &[p(x)u_j\frac{d}{dx}\varphi_j^{(N+1)}\frac{d}{dx}\varphi_i^{(N+1)} + r(x)u_j\frac{d}{dx}\varphi_j^{(N+1)}\varphi_i^{(N+1)}\\ &+q(x)u_j\varphi_i^{(N+1)}\varphi_j^{(N+1)} - f(x)\varphi_i^{(N+1)}]dx + \alpha_0 u_j\varphi_j^{(N+1)}(0)\varphi_i^{(N+1)}(0)\\ &+\beta_0 u_j\varphi_j^{(N+1)}(1)\varphi_i^{(N+1)}(1) - \alpha_1\varphi_i^{(N+1)}(0) - \beta_1\varphi_j^{(N+1)}(1) = 0\end{aligned}$$

于是由此得到方程组

$$\begin{aligned}&a_{i,i-1}u_{i-1} + a_{i,i}u_i + a_{i,i+1}u_{i+1} - b_i = 0, \quad i=1,2,\cdots,N-1\\ &a_{0,0}u_0 + a_{0,1}u_1 - b_0 = 0\\ &a_{N,N-1}u_{N-1} + a_{N,N}u_N - b_N = 0\end{aligned} \tag{4.2.60}$$

其中

当 $i=1,\cdots,N-1,$ 时

$$a_{i,i-1}=h^{-2}[-\int_{x_{i-1}}^{x_i}p(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x-x_{i-1})r(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i-x)(x-x_{i-1})q(x)dx]$$

$$a_{i,i}=h^{-2}[\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}p(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x-x_{i-1})r(x)dx-\int_{x_i}^{x_{i+1}}(x_{i+1}-x)r(x)dx+\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x-x_{i-1})^2q(x)dx+\int_{x_i}^{x_{i+1}}(x_{i+1}-x)^2q(x)dx]$$

$$a_{i,i+1}=h^{-2}[-\int_{x_i}^{x_{i+1}}p(x)dx+\int_{x_{i+1}}^{x_{i+1}}(x_{i-1}-x)r(x)dx+\int_{x_i}^{x_{i+1}}(x-x_i)(x_{i+1}-x)q(x)dx]$$

当 $i=0$ 时

$$a_{0,0}=h^{-2}\left[\int_0^h p(x)dx-\int_0^h(h-x)r(x)dx+\int_0^h(h-x)^2q(x)dx\right]+\alpha_0$$

$$a_{0,1}=h^{-2}\left[-\int_0^h p(x)dx+\int_0^h(h-x)r(x)dx+\int_0^h x(h-x)q(x)dx\right]$$

当 $i=N$ 时

$$a_{N,N-1}=h^{-2}\left[-\int_{1-h}^1 p(x)dx-\int_{1-h}^1(x-1+h)r(x)dx+\int_{1-h}^1(1-x)(x-1+h)q(x)dx\right]$$

$$a_{N,N}=h^{-2}\left[\int_{1-h}^1 p(x)dx+\int_1^{1-h}(1-x)r(x)dx+\int_{1-h}^1(1-x)^2q(x)dx\right]+\beta_0$$

$$b_i=h^{-1}\left[-\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x-x_{i-1})f(x)dx+\int_{x_i}^{x_i+1}(x_{i+1}-x)f(x)dx\right],\quad i=1,2,\cdots,N-1$$

$$b_0=h^{-1}\int_0^h(h-x)f(x)dx-\alpha_0$$

$$b_N=h^{-1}\int_{1-h}^1(x-1+h)f(x)dx-\beta_1$$

同前面一样, 也可以采取直接近似变分方程 (4.2.58) 中积分来得到差分格式, 若在 (4.2.58) 式中第一个积分项用中矩形公式, 其余积分项用梯形公式近似, 则

$$\sum_{i=1}^{N} p_{i-\frac{1}{2}}\left(\frac{u_i-u_{i-1}}{h}\right)\left(\frac{v_i-v_{i-1}}{h}\right)h+\sum_{i=1}^{N-1}\left[r_i\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2h}v_i+q_iu_iv_i+f_iv_i\right]h$$
$$+\frac{h}{2}\left[r_0\frac{u_1-u_0}{h}+r_N\frac{u_N-u_{N-1}}{h}v_N\right] \tag{4.2.61}$$
$$\frac{h}{2}[q_0u_0v_0+f_0v_0+q_Nu_Nv_N+f_Nv_N]+\alpha_0u_0v_0+\beta_0u_Nv_N-\alpha_1v_0-\beta_1v_N=0$$

在 (4.2.61) 式中, v_i 是任意的网格函数, 逐个选取 $v_i=(i=0,1,\cdots,N)$, 使 v_i 在第 i 个结点上取值为 1, 其余结点取值为 0(也即令 $v_i=\delta(i-j), j=0,1,\cdots,N$), 则

$$\begin{aligned}&p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i-u_{i-1}}{h}+[r_i\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2h}+q_iu_i+f_i]h=0,\quad i=1,\cdots,N-1\\&[-p_{\frac{1}{2}}+\frac{h}{2}r_0]\frac{u_1-u_0}{h}=(\alpha_0+\frac{h}{2}q_0)u_0+\alpha_1-\frac{h}{2}f_0\\&[p_{N-\frac{1}{2}}+\frac{h}{2}r_N]\frac{u_N-u_{N-1}}{h}=-(\beta_0+\frac{h}{2}q_N)u_N+\beta_1-\frac{h}{2}f_N\end{aligned} \tag{4.2.62}$$

也即

$$\begin{aligned}&(2p_{i-\frac{1}{2}}+r_ih)u_{i-1}-(2p_{i-\frac{1}{2}}+2h^2q_i)u_i-r_ihu_{i+1}=2h^2f_i,\quad i=1,\cdots,N-1\\&(2p_{\frac{1}{2}}-hr_0+2h\alpha_0+h^2q_0)u_0+(hr_0-2p_{\frac{1}{2}})u_1=2h\alpha_1-h^2f_0\\&-(2p_{N-\frac{1}{2}}+hr_N)+(2p_{N-\frac{1}{2}}+hr_N+2h\beta_0+h^2q_N)u_N=2h\beta_1-h^2f_N\end{aligned} \tag{4.2.63}$$

可以验证该格式对原问题是 $O(h)$ 阶近似的差分格式. 为了得到 $O(h^2)$ 近似的格式, 我们对变分方程 (4.2.58) 式第一、第二中的积分项用中矩形公式, 第三、第四积分项用梯形公式, 得到

$$\sum_{i=1}^{N} p_{i-\frac{1}{2}}(\frac{u_i-u_{i-1}}{h})(\frac{v_i-v_{i-1}}{h})h+\sum_{i=1}^{N-1}r_i\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2h}v_i2h+\sum_{i=1}^{N-1}[q_iu_iv_i+f_iv_i]h$$
$$+\frac{h}{2}[q_0u_0v_0+f_0v_0+q_Nu_Nv_N+f_Nv_N]+\alpha_0u_0v_0+\beta_0u_Nv_N-\alpha_1v_0-\beta_1v_N=0 \tag{4.2.64}$$

同理可得

$$\begin{aligned}&-p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i-u_{i-1}}{h}+r_i(u_{i+1}-u_{i-1})+[q_iu_i+f_i]h=0,\quad i=1,\cdots,N-1\\&-p_{\frac{1}{2}}+\frac{u_1-u_0}{h}=-(\alpha_0+\frac{h}{2}q_0)u_0+\alpha_1-\frac{h}{2}f_0\\&p_{N-\frac{1}{2}}\frac{u_N-u_{N-1}}{h}=-(\beta_0+\frac{h}{2}q_N)u_N+\beta_1-\frac{h}{2}f_N\end{aligned} \tag{4.2.65}$$

也即

$$
\begin{aligned}
&(2p_{i-\frac{1}{2}}+r_ih)u_{i-1}-(p_{i-\frac{1}{2}}+h^2q_i)u_i-r_ihu_{i+1}=2h^2f_i, \quad i=1,\cdots,N-1\\
&(2p_{\frac{1}{2}}+2h\alpha_0+h^2q_0)u_0-2p_{\frac{1}{2}})u_1=2h\alpha_1-h^2f_0\\
&-2p_{N-\frac{1}{2}}+(2p_{N-\frac{1}{2}}+2h\beta_0+h^2q_N)u_N=2h\beta_1-h^2f_N
\end{aligned}
\tag{4.2.66}
$$

可以验证该格式为 $O(h^2)$ 阶的差分格式.

§4.3 Laplace 方程的五点差分格式

考虑 Laplace 方程的 Dirchlet 边值问题

$$\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2u}{\partial y^2}=0, \quad (x,y)\in\Omega=\{0<x<1,0<y<1\} \tag{4.3.1}$$

$$u(x,y)=f(x,y), \quad (x,y)\in\partial\Omega \tag{4.3.2}$$

其中 $\partial\Omega$ 为区域 Ω 的边界.

对正方形区域用两组平行于坐标轴的直线 $x_i=ih$, $y_j=jh$ 进行剖分, 假定步长为 $h=\dfrac{1}{M}$, 则共有 $(M-1)$ 个内结点. 在每个内结点 (i,j) 上, 用二阶中心差分格式代替方程 (4.3.1) 中的二阶偏导数, 得

$$\frac{u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j}}{h^2}+\frac{u_{i,j+1}-2u_{i,j}+u_{i,j-1}}{h^2}=0 \tag{4.3.3}$$

即

$$u_{i,j}=\frac{1}{4}(u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1}) \tag{4.3.4}$$

显然 $u_{i,j}$ 是作为四个相邻点的平均值来计算的, 这就是 Laplace 方程在等步长情况下最简单的五点有限差分近似. 该格式具有二阶精度, 其近似的截断误差可由 Taylor 级数展开方法得到 (假定高阶导数总是存在)

$$u_{i+1,j}=(u+h\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{h^3}{6}\frac{\partial^3u}{\partial x^3}+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4u}{\partial x^4}+\cdots)_{i,j} \tag{4.3.5}$$

$$u_{i-1,j}=(u-h\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2u}{\partial x^2}-\frac{h^3}{6}\frac{\partial^3u}{\partial x^3}+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4u}{\partial x^4}-\cdots)_{i,j} \tag{4.3.6}$$

$$u_{i,j+1}=(u+h\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2u}{\partial y^2}+\frac{h^3}{6}\frac{\partial^3u}{\partial y^3}+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4u}{\partial y^4}+\cdots)_{i,j} \tag{4.3.7}$$

$$u_{i,j-1}=(u-h\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2u}{\partial y^2}-\frac{h^3}{6}\frac{\partial^3u}{\partial y^3}+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4u}{\partial y^4}-\cdots)_{i,j} \tag{4.3.8}$$

将上述四式代人 (4.3.3) 式中, 得

$$\frac{u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j}}{h^2}+\frac{u_{i,j+1}-2u_{i,j}+u_{i,j-1}}{h^2}=(\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2u}{\partial y^2})_{i,j}+\frac{h^2}{12}(\frac{\partial^4u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4u}{\partial y^4})_{i,j} \tag{4.3.9}$$

因此截断误差阶为 $O(h^2)$. 若记截断误差为 $R(u)$,

$$M = \max_{\Omega}\{|\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}|, |\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}|\} \tag{4.3.10}$$

则

$$|R(u)| \leqslant \frac{h^2}{12}M \tag{4.3.11}$$

由差分格式 (4.3.4) 再结合边界条件的差分格式即 $u_{i,j} = f_{i,j}$, $(i,j) \in \partial\Omega$ 即可求得内结点上的近似值. 下面通过例题来说明.

例 1 对边值问题

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad 0 < x < 2,\ 0 < y < 2$$

$$u(0,y) = 0,\ u(2,y) = y(2-y), \quad 0 < y < 2$$

$$u(x,0) = 0, \quad u(x,2) = \begin{cases} x, & 0 < x < 1 \\ 2-x, & 1 \leqslant x < 2 \end{cases}$$

分别取步长 $h = \frac{2}{3}$ 和 $h = \frac{1}{2}$ 求解.

解 (1) 当取 $h = \frac{2}{3}$ 时, 求解区域的结点如图 4.2(a) 所示, 其中已标出边界上的函数值. 在内结点上应用五点有限差分近似, 可得

$$\begin{aligned} -4u_{11} + u_{21} + u_{12} \qquad\qquad &= 0 \\ u_{11} - 4u_{21} \qquad + u_{22} &= -\frac{8}{9} \\ u_{11} \qquad - 4u_{12} + u_{22} &= -\frac{2}{3} \\ u_{21} + u_{12} - 4u_{22} &= -\frac{14}{9} \end{aligned} \tag{4.3.12}$$

又记 $\boldsymbol{u} = (u_{11}, u_{21}, u_{12}, u_{22})^T$, 则上述差分方程可写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{12} \\ u_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{8}{9} \\ -\frac{2}{3} \\ -\frac{14}{9} \end{bmatrix} \tag{4.3.13}$$

解得 $\boldsymbol{u} = (u_{11}, u_{21}, u_{12}, u_{22})^T = (\frac{7}{36}, \frac{5}{12}, \frac{13}{36}, \frac{7}{12})^T$.

(2) 当取 $h = \frac{1}{2}$ 时, 结点如图 4.2(b) 所示, 边界上的函数值也已标出. 类似地可

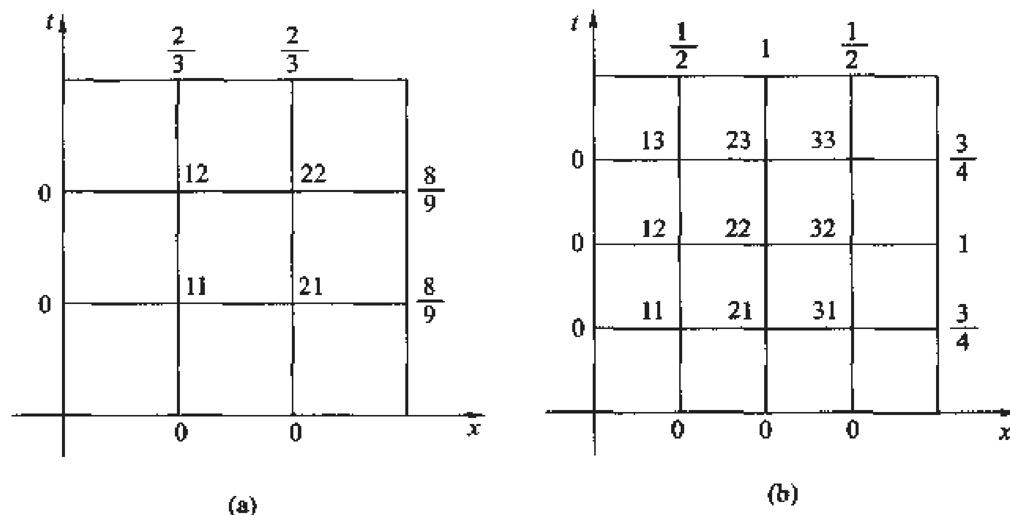


图 4.2 $h=\frac{2}{3}$ 和 $h=\frac{1}{2}$ 时的网格剖分图

得差分方程

$$\begin{aligned}
u_{21}+u_{12}+0+0-4u_{11}&=0\\
u_{31}+u_{22}+u_{11}+0-4u_{21}&=0\\
\frac{3}{4}+u_{32}+u_{21}+0-4u_{31}&=0\\
u_{22}+u_{13}+u_{11}+0-4u_{12}&=0\\
u_{32}+u_{23}+u_{12}+u_{21}-4u_{22}&=0\\
1+u_{33}+u_{22}+u_{31}-4u_{32}&=0\\
u_{23}+\frac{1}{2}+0+u_{12}-4u_{13}&=0\\
u_{33}+1+u_{13}+u_{22}-4u_{23}&=0\\
\frac{3}{4}+\frac{1}{2}+u_{23}+u_{32}-4u_{33}&=0
\end{aligned}\tag{4.3.14}$$

由此解得

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{u}&=(u_{11},u_{21},u_{31},u_{12},u_{22},u_{32},u_{13},u_{23},u_{33})^T\\
&=(\frac{7}{64},\frac{51}{224},\frac{177}{448},\frac{47}{224},\frac{13}{32},\frac{135}{224},\frac{145}{448},\frac{131}{224},\frac{39}{64})^T.
\end{aligned}$$

□

一般地, Laplace 方程第一边值问题用五点差分格式离散后, 若有 $M\times M$ 个内结点, 并记

$$\boldsymbol{u}=(u_{11},u_{21},\cdots,u_{M1},u_{12},u_{22},\cdots,u_{M2},u_{1M},u_{2M},\cdots,u_{MM})^T$$

则所得的线性代数方程组的系数矩阵是块三对角的形式

$$\begin{bmatrix} B & -I & & & \\ -I & B & -I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -I & B & -I \\ & & & -I & B \end{bmatrix}_{M\times M}$$

其中 I 是 M 阶单位矩阵, B 是 M 阶三对角方阵

$$B=\begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix}_{M\times M}$$

例如方程组 (4.3.13) 和 (4.3.14) 的系数矩阵分别可以写成

$$\begin{bmatrix} B & -I \\ -I & B \end{bmatrix}, \quad \text{其中} \quad B=\begin{bmatrix} 4 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad I=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

和

$$\begin{bmatrix} B & -I & \\ -I & B & -I \\ & -I & B \end{bmatrix}, \quad \text{其中} \quad B=\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad I=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

显然这两个矩阵是对角占优的, 有唯一解.

当 x 方向和 y 方向的网格步长不相等时, 例如分别为 h_1 和 h_2, 则不难推得差分方程 (4.3.3) 将变成

$$\frac{2(u_{i+1,j}+u_{i-1,j})}{1+\beta^2}+\frac{2\beta^2(u_{i,j+1}+u_{i,j-1})}{1+\beta^2}-4u_{i,j}=0 \tag{4.3.15}$$

其中 $\beta=\dfrac{h_1}{h_2}$. 截断误差为 $O(h_1^2)+O(h_2^2)$.

一般地, 如图 4.3 所示, 对 Laplace 方程, 我们希望能导出这样一种差分近似

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=\alpha_1 u_1+\alpha_2 u_2+\alpha_2 u_3+\alpha_4 u_4-\alpha_0 u_0=0 \tag{4.3.16}$$

式中 u_1,u_2,u_3,u_4 是围绕 u_0 选定的网格点上的 u 值, $\alpha_0,\cdots,\alpha_4$ 是待定系数. 为求这些系数, 首先将 u_1,u_2,u_3,u_4 在 u_0 处作 Taylor 级数展开

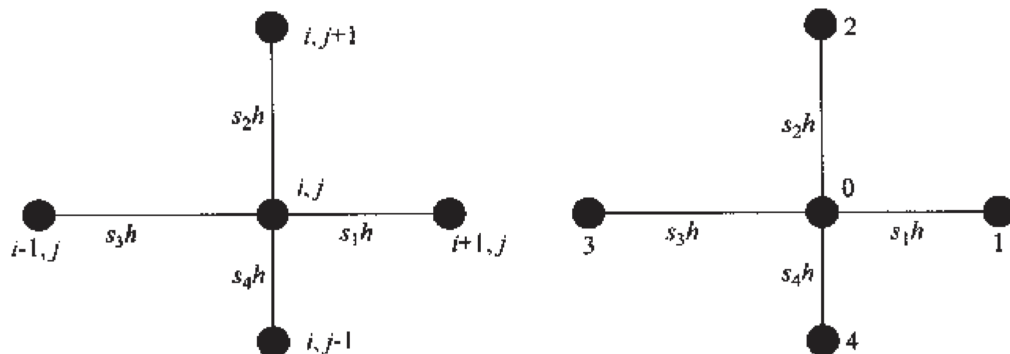


图 4.3 不等间距网格结点示意图

$$u_1 = u(i+s_1h, j) = [u + (s_1h)\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(s_1h)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(s_1h)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{(s_1h)^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}]_0$$

$$u_3 = u(i-s_3h, j) = [u + (-s_3h)\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(-s_3h)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(-s_3h)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{(-s_3h)^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}]_0$$

$$u_2 = u(i, j+s_2h) = [u + (s_2h)\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{(s_2h)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{(s_2h)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial y^3} + \frac{(s_2h)^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}]_0$$

$$u_4 = u(i, j-s_4h) = [u + (-s_4h)\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{(-s_4h)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{(-s_4h)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial y^3} + \frac{(-s_4h)^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}]_0$$

再将这些表达式代入 (4.3.16) 式中, 整理得

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = {} & u_0(-\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) \\ & + \frac{\partial u}{\partial x}(\alpha_1 s_1 h - \alpha_3 s_3 h) + \frac{\partial u}{\partial y}(\alpha_2 s_2 h - \alpha_4 s_4 h) \\ & + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}[\alpha_1(s_1h)^2 + \alpha_3(s_3h)^2] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}[\alpha_2(s_2h)^2 + \alpha_4(s_4h)^2] \\ & + \frac{1}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}[\alpha_1(s_1h)^3 - \alpha_3(s_3h)^3] + \frac{1}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial y^3}[\alpha_2(s_2h)^3 - \alpha_4(s_4h)^3] \\ & + \frac{1}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}[\alpha_1(s_1h)^4 + \alpha_3(s_3h)^4] + \frac{1}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}[\alpha_2(s_2h)^4 + \alpha_4(s_4h)^4]\end{aligned}$$

比较方程两端的系数, 得到含有五个未知数 $\alpha_0, \cdots, \alpha_4$ 的方程组

$$\begin{aligned}-\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 &= 0 \\ \alpha_1 s_1 h - \alpha_3 s_3 h &= 0 \\ \alpha_2 s_2 h - \alpha_4 s_4 h &= 0 \\ \alpha_1(s_1h)^2 + \alpha_3(s_3h)^2 &= 2 \\ \alpha_2(s_2h)^2 + \alpha_4(s_4h)^2 &= 2\end{aligned} \tag{4.3.17}$$

求得唯一解

$$
\begin{aligned}
\alpha_0 &= 2[\frac{1}{s_2s_3h^2} + \frac{1}{s_2s_4h^2}] \\
\alpha_1 &= \frac{2}{s_1h(s_1h + s_3h)} \\
\alpha_2 &= \frac{2}{s_2h(s_2h + s_4h)} \\
\alpha_3 &= \frac{2}{s_3h(s_1h + s_3h)} \\
\alpha_4 &= \frac{2}{s_4h(s_2h + s_4h)}
\end{aligned}
\tag{4.3.18}
$$

由这些系数就可以得到不等间距情形下 Laplace 方程的五点差分格式

$$
\alpha_0u_0 = \alpha_1u_1 + \alpha_2u_2 + \alpha_3u_3 + \alpha_4u_4 \tag{4.3.19}
$$

当 $s_1 = s_2 = s_3 = s_4 = 1$ 时, 即等间隔网格, 这时 $\alpha_0 = 4, \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 1$, 上式即为 (4.3.3) 式, 当 $s_1 = s_3$, $s_2 = s_4$ 时, 即得 (4.3.15) 式.

例 2 考虑不等间距网格点上的椭圆型偏微分方程

$$
\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + L\frac{\partial u}{\partial y} = 0 \tag{4.3.20}
$$

的差分格式, 其中 L 为常数.

解 对方程 (4.3.20), 仍以下式来近似 (参考图 4.3):

$$
(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + L\frac{\partial u}{\partial y})_0 = \alpha_1u_1 + \alpha_2u_2 + \alpha_3u_3 + \alpha_4u_4 - \alpha_0u_0 = 0 \tag{4.3.21}
$$

其中参数 $\alpha_0,\cdots,\alpha_4$ 待定. 同前面的推导类似, 将 u_1,u_2,u_3,u_4 在 u_0 处作 Taylor 展开, 并将这些展开式代入上式, 可得方程

$$
\begin{aligned}
-\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 &= 0 \\
\alpha_1s_1h - \alpha_2s_3h &= 0 \\
\alpha_2s_2h - \alpha_4s_4h &= L \\
\alpha_1(s_1h)^2 + \alpha_3(s_3h)^2 &= 2 \\
\alpha_2(s_2h) + \alpha_4(s_4h)^2 &= 2
\end{aligned}
$$

由此解得

$$
\begin{aligned}
\alpha_0 &= \frac{2}{s_1s_3h^2} + \frac{2}{s_2s_4h^2} + \frac{(s_4 - s_2)h}{s_2s_4h^2} \\
\alpha_1 &= \frac{2}{s_1(s_1 + s_3)h^2}, \quad \alpha_2 = \frac{2 + s_2hL}{s_2(s_2 + s_4)h^2} \\
\alpha_3 &= \frac{2}{s_3(s_1 + s_3)h^2}, \quad \alpha_4 = \frac{2 - s_2hL}{s_4(s_2 + s_4)h^2}
\end{aligned}
\tag{4.3.22}
$$

将这些表达式代入 (4.3.20) 式, 即可得 (4.3.22) 式的差分格式. 对于等间隔的网格点, (4.3.22) 式成为

$$\alpha_0 = \frac{4}{h^2}, \quad \alpha_1 = \alpha_3 = \frac{1}{h^2}$$
$$\alpha_2 = \frac{2+hL}{2h^2}, \quad \alpha_4 = \frac{2-hL}{2h^2}$$

□

上面推导了 Laplace 方程的几种五点差分格式, 现推导高阶差分格式. 方法是采用 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 和 $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ 的高阶近似公式. 根据二阶导数算子的近似公式 (2.4.22), 知

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}(\delta_x^2 - \frac{1}{12}\delta_x^4) + O(h^4)$$
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}(\delta_x^2 - \frac{1}{12}\delta_x^4) + O(h^4)$$

于是对图 4.4(a) 所示的网格点, 可得二阶偏导数的四阶精度格式

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_0 = \frac{1}{12h^2}(-u_7 + 16u_3 - 30u_0 + 16u_1 - u_5) + O(h^4)$$
$$(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})_0 = \frac{1}{12h^2}(-u_6 + 16u_2 - 30u_0 + 16u_4 - u_8) + O(h^4)$$

代入 Laplace 方程, 可得其 $O(h^4)$ 阶精度的差分格式为

$$u_0 = \frac{1}{60}(-u_7 + 16u_3 + 16u_1 - u_5 - u_6 + 16u_2 + 16u_4 - u_8) \tag{4.3.23}$$

对图 4.4(b) 的网格点, 可以令

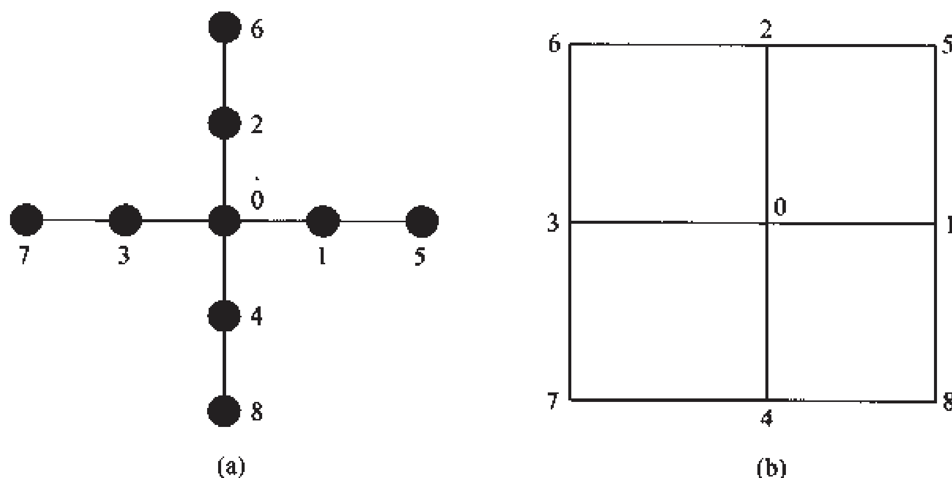


图 4.4 九点有限差分格式的网格点

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=-\alpha_0 u_0+\sum_{i=1}^{9}\alpha_i u_i \tag{4.3.24}$$

然而采用前面的方法可类似地求得系数 α_i, 特别地, 对等间距网格, 为

$$\begin{aligned}&\alpha_0=\frac{10}{3h^2},\quad \alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\alpha_4=\frac{2}{3h^2}\\&\alpha_5=\alpha_6=\alpha_7=\alpha_8=\frac{1}{6h^2}\end{aligned} \tag{4.3.25}$$

因此 Laplace 方程另一个 $O(h^4)$ 阶精度的差分格式为

$$u_0=\frac{1}{20}[4(u_1+u_2+u_3+u_4)+(u_5+u_6+u_7+u_8)] \tag{4.3.26}$$

下面将看到, 该格式确可到达 $O(h^4)$ 阶精度.

下面推导一个 $O(h^6)$ 阶精度的差分格式. 考虑如下的 Poission 方程

$$-\Delta u=-(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})=f(x,y) \tag{4.3.27}$$

其中 $f(x,y)$ 为已知函数, 且假定 u 与 f 均有需要的高阶导数. 易知在结点 (i,j) 处有

$$\frac{\delta_x^2 u_{i,j}}{h^2}=(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6})_{i,j}+O(h^6) \tag{4.3.28}$$

$$\frac{\delta_x^2 u_{i,j}}{h^2}=(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}+\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial y^6})_{i,j}+O(h^6) \tag{4.3.29}$$

其中 δ_x^2,δ_y^2 分别 x,y 方向的二阶中心差分算子, 两式相加, 得

$$\frac{1}{h^2}(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j}=(\Delta u)_{i,j}+\frac{h^2}{12}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4 u}{\partial y^4})_{i,j}+\frac{h^4}{360}(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}+\frac{\partial^6 u}{\partial y^6})_{i,j}+O(h^6) \tag{4.3.30}$$

又

$$\begin{aligned}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}&=(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})u-2\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2}\\&=-\Delta f-2\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2}\end{aligned} \tag{4.3.31}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}+\frac{\partial^6 u}{\partial y^6}&=(\frac{\partial^4}{\partial x^4}-\frac{\partial^4}{\partial x^2\partial y^2}+\frac{\partial^4}{\partial y^4})(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})u\\&=-(\frac{\partial^4}{\partial x^4}-\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2}+\frac{\partial^4}{\partial y^4})f\\&=-(\Delta^2 f-3\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})\end{aligned} \tag{4.3.32}$$

将 (4.3.31) 和 (4.3.32) 两式代入 (4.3.30) 式中得

$$\begin{aligned}\frac{1}{h^2}(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j} &= -f_{i,j}-\frac{h^2}{12}(\Delta f)_{i,j}-\frac{h^2}{6}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}\\ &\quad -\frac{h^4}{360}(\Delta^2 f-3\frac{\partial^4 f}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}+O(h^6)\\ &= -f_{i,j}-\frac{h^2}{12}(\Delta f)_{i,j}-\frac{h^4}{360}(\Delta^2 f)_{i,j}+\frac{h^4}{120}(\frac{\partial^4 f}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}\\ &\quad -\frac{h^2}{6}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}+O(h^6)\end{aligned} \tag{4.3.33}$$

为了给出 $(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}$ 的差分格式, 利用 (4.3.28)~ (4.3.29) 式得

$$\begin{aligned}\frac{\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}}{h^4} &= (\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}+\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})u_{i,j}\\ &= (\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}-\frac{h^2}{12}(\frac{\partial^4 f}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}+O(h^4)\end{aligned}$$

也即

$$(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}=\frac{\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}}{h^4}+\frac{h^2}{12}(\frac{\partial^4 f}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}+O(h^4) \tag{4.3.34}$$

将 (4.3.34) 式代入 (4.3.33) 式得

$$\frac{1}{h^2}(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j}=-f_{i,j}-\frac{h^2}{12}(\Delta f)_{i,j}-\frac{h^4}{360}(\Delta^2 f)_{i,j}-\frac{\delta_x^2\delta_y^2}{6h^2}u_{i,j}-\frac{h^4}{180}(\frac{\partial^4 f}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j}+O(h^6)$$

由此得到 Poisson 方程 $O(h^6)$ 精度的差分格式

$$\frac{(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j}}{h^2}-\frac{\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}}{6h^2}=-f_{i,j}-\frac{h^2}{12}(\Delta f)_{i,j}-\frac{h^4}{360}(\Delta^2 f)_{i,j}-\frac{h^4}{180}(\frac{\partial^4 f}{\partial x^2\partial y^2})_{i,j} \tag{4.3.35}$$

还可得到 Poisson 方程 $O(h^4)$ 精度的差分格式

$$\frac{(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j}}{h^2}-\frac{\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}}{6h^2}=-f_{i,j}-\frac{h^2}{12}(\Delta f)_{i,j} \tag{4.3.36}$$

若 $f(x,y)=0$, 由 (4.3.35) 式即得到 Laplace 方程 $O(h^4)$ 阶精度的格式, 为

$$6(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j}+\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}=0 \tag{4.3.37}$$

也即

$$\begin{aligned}&(u_{i-1,j-1}+u_{i-1,j+1}+u_{i+1,j-1}+u_{i+1,j+1})\\ &\quad +4(u_{i-1,j}+u_{i+1,j}+u_{i,j-1}+u_{i,j+1})-20u_{i,j}=0\end{aligned} \tag{4.3.38}$$

§4.4 有限体积法

有限体积法也称**积分插值法**. 当把微分方程化为积分方程时, 导数降低一阶. 考虑 Poisson 方程

$$-\Delta u = -(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}) = f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega \tag{4.4.1}$$

其中 Ω 是 x, y 平面上一有界区域.

在 Ω 的某一子区域 D 上, 两端对方程 (4.4.1) 积分, 根据 第一 Green 公式

$$\int\int_D v\Delta u dxdy = \int_{\partial D} \frac{\partial u}{\partial n} v ds - \int\int_D \nabla u \cdot \nabla v dxdy$$

并取 $v = 1$ 即得

$$\int\int_D \Delta u dxdy = \int_{\partial D} \frac{\partial u}{\partial n} ds$$

于是有

$$-\oint_{\partial D} \frac{\partial u}{\partial n} ds = \int_D \int f dxdy, \quad \forall D \subset \Omega \tag{4.4.2}$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 表示边界 ∂D 的外法线向. 如图 4.5 所示, 对任一内结点 D, 有四个相邻结点 P_1, P_2, P_3, P_4, 过 $PP_i (i = 1,2,3,4)$ 中点的垂线围成一正方形区域 $ABCD$, 记为 D_{ij}, 边界用 ∂D_{ij} 表示. 式 (4.4.2) 在 D_{ij} 上也应成立, 即

$$-\oint_{\partial D_{ij}} \frac{\partial u}{\partial n} ds = \int\int_{D_{ij}} f dxdy \tag{4.4.3}$$

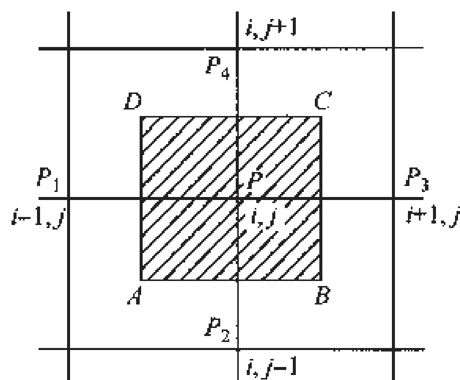


图 4.5 积分区域示意图

用中矩形公式近似线积分, 再用中心差商代替外法向导数, 则

$$
\begin{aligned}
\oint_{\partial D_{ij}} \frac{\partial u}{\partial n} ds &= \oint_{\partial D_{ij}} [\frac{\partial u}{\partial x}\cos(x,\boldsymbol{n}) + \frac{\partial u}{\partial y}\cos(y,\boldsymbol{n})]ds = \oint_{\partial D_{ij}} \oint_{\partial D_{ij}} [\frac{\partial u}{\partial x}dy - \frac{\partial u}{\partial y}dx] \\
&= -\int_{AB} \frac{\partial u}{\partial y}dx + \int_{BC} \frac{\partial u}{\partial x}dy - \int_{CD} \frac{\partial u}{\partial y}dx + \int_{DA} \frac{\partial u}{\partial x}dy \\
&\approx -(\frac{\partial u}{\partial y})_{j-\frac{1}{2}}h + (\frac{\partial u}{\partial x})_{i+\frac{1}{2}}h + (\frac{\partial u}{\partial y})_{j+\frac{1}{2}}h - (\frac{\partial u}{\partial x})_{i-\frac{1}{2}}h \\
&\approx \frac{u_{i,j-1} - u_{i,j}}{h}h + \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h}h + \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{h}h + \frac{u_{i-1,j} - u_{i,j}}{h}h \\
&= u_{i,j-1} + u_{i,j+1} + u_{i-1,j} + u_{i+1,j} - 4u_{i,j} \qquad (4.4.4)
\end{aligned}
$$

又

$$\int\int_{D_{ij}} f dxdy = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{i-\frac{1}{2}}}^{y_{i+\frac{1}{2}}} f dxdy \approx h^2 f_{i,j} \qquad (4.4.5)$$

将 (4.4.4)~(4.4.5) 式代入 (4.4.3) 式中, 即得五点差分公式

$$4u_{i,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} = h^2 f_{i,j} \qquad (4.4.6)$$

§4.5 Poisson 方程基于 Riesz 法的差分格式

与一维类似, 基于 Riesz 法的差分格式首先要得到问题的变分形式, 下面讨论二维椭圆型边值问题的变分形式.

§4.5.1 二维椭圆型边值问题的变分形式

设 Ω 是平面中的有界区域, 其边界 $\partial\Omega$ 是分段光滑的闭曲线, 记 $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$,

$\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$. 考虑下面的二阶变系数椭圆型方程

$$-\frac{\partial}{\partial x}(p\frac{\partial u}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(p\frac{\partial u}{\partial y}) + q(x,y)u = f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega \tag{4.5.1}$$

$$u(x,y)|_{\Gamma_1} = \alpha(x,y), \quad (x,y) \in \Gamma_1 \tag{4.5.2}$$

$$[p(x,y)\frac{\partial u}{\partial n} + \beta_0 u]|_{\Gamma_2} = \beta_1(x,y), \quad (x,y) \in \Gamma_2 \tag{4.5.3}$$

其中 $p(x,y) \in C^1(\Omega)$ 且 $\min p(x,y) > 0$, $q(x,y) \in C(\Omega)$ 且 $q(x,y) \geqslant 0$, $\beta_0(x,y) \in C(\Omega)$ 且 $\beta_0(x,y) \geqslant 0$, $f(x,y) \in C^0(\Omega)$, $\alpha(x,y) \in C(\Gamma_1)$, $\beta_1(x,y) \in C(\Gamma_2)$. 其中的第一边界条件 (4.5.2) 也称**强制边界条件**, 边界条件 (4.5.3) 也称**自然边界条件**. 自然边界条件在变分形式中自动满足.

设容许函数空间和试探函数空间分别为

$$M = \{u \in H^1(\Omega) | u|_{\Gamma_1} = \alpha(x,y)\} \tag{4.5.4}$$

$$M_0 = \{v \in H^1(\Omega) | u|_{\Gamma_1} = 0\} \tag{4.5.5}$$

对 $u \in M$, $\forall v \in M_0$, 将 $v(x,y)$ 乘以方程 (4.5.1) 的两端, 然后在 Ω 上积分得

$$\int\int_\Omega [-\frac{\partial}{\partial x}(p\frac{\partial u}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(p\frac{\partial u}{\partial y})]vdxdy + \int\int_\Omega q(x,y)uvdxdy = \int\int_\Omega fvdxdy \tag{4.5.6}$$

根据Green 公式, 有

$$\int\int_\Omega p\nabla u \cdot \nabla vdxdy - \int_{\partial\Omega} p\frac{\partial u}{\partial n}vds + \int\int_\Omega quvdxdy = \int\int_\Omega fvdxdy$$

也即

$$\int\int_\Omega (p\nabla u \cdot \nabla vdxdy + quv)dxdy - \int_{\Gamma_2} (\beta_1 - \beta_0 u)vds - \int\int_\Omega fvdxdy = 0$$

$$\int\int_\Omega (p\nabla u \cdot \nabla vdxdy + quv)dxdy + \int_{\Gamma_2} \beta_0 uvds - [\int\int_\Omega fvdxdy + \int_{\Gamma_2} \beta_1 vds] = 0 \tag{4.5.7}$$

若令

$$a(u,v) = \int\int_\Omega (p\nabla u \cdot \nabla vdxdy + quv)dxdy + \int_{\Gamma_2} \beta_0 uvds \tag{4.5.8}$$

$$F(v) = \int\int_\Omega fvdxdy + \int_{\Gamma_2} \beta_1 vds \tag{4.5.9}$$

则与边值问题 (4.5.1)~(4.5.3) 对应的变分方程为

$$a(u,v) = F(v), \quad u \in M, \ \forall v \in M_0 \tag{4.5.10}$$

变分问题为

$$J(u) \triangleq \frac{1}{2}a(u,u) - F(u) = \min \tag{4.5.11}$$

读者不难验证 $a(u,v)$ 是一个对称双线性泛函, 且满足强制性条件. $F(v)$ 是有界线性泛函, 因此由 Lax-Milgram 引理 4.2.1 知, 方程 (4.5.10) 的解存在唯一. 由于 $a(u,v)$ 对称, 由 Lax-Milgram 引理的推论 4.2.1 知, 变分方程 (4.5.10) 与变分问题 (4.5.11) 等价. 下面证边值问题 (4.5.1)~(4.5.3) 的解与变分问题 (4.5.11) 的解一致.

定理 4.5.1 u 是边值问题(4.5.1)~(4.5.3)的解的充要条件是 u 是变分问题 (4.5.11) 的解.

证明 *必要性* 设 u_0 是边值问题的解, 则由 (4.5.6) 式知, u_0 满足变分方程 (4.5.10), 于是令 $u = u_0 + \lambda v$, $u_0 \in M, \lambda \in \mathbf{R}, v \in M_0$, 有

$$
\begin{aligned}
J(u) = J(u_0 + \lambda v) &= J(u_0) + \lambda[a(u_0, v) - F(v)] + \frac{1}{2}\lambda^2 a(v,v) \\
&= J(u_0) + \frac{1}{2}\lambda^2 a(v,v) > J(u_0), \quad \forall u \in M
\end{aligned}
$$

即 u_0 是变分问题 (4.5.11) 的解.

充分性 设 u_0 是变分问题 (4.5.11) 的解, 即满足 (4.5.10) 式, 由于 $a(u,v)$ 是对称双线性泛函, 故由 Lax-Milgram 引理的推论 4.2.1 知, u_0 也满足变分方程 (4.5.10), 即 $a(u_0,v) = F(v)$, $\forall v \in M_0$. 于是, 由 Green 公式得

$$
\begin{aligned}
&a(u_0, v) - F(v) \\
=& \int\int_\Omega (p\nabla u_0 \cdot \nabla v + q u_0 v) dxdy + \int_{\Gamma_2} \beta_0 u v ds - \int\int_\Omega f v dxdy - \int_{\Gamma_2} \beta_1 v ds \\
=& \int\int_\Omega [-\nabla \cdot \nabla p u_0 + q u_0 - f] v dxdy + \int_{\partial\Omega} p\frac{\partial u_0}{\partial n} v ds + \int_{\Gamma_2} [\beta_0 u_0 - \beta_1] v ds \\
=& \int\int [-\nabla \cdot \nabla p u_0 + q u_0 - f] v dxdy + \int_{\Gamma_2} [p\frac{\partial u_0}{\partial n} + \beta_0 u_0 - \beta_1] v ds
\end{aligned}
$$

根据变分法基本引理, 由上式可知

$$
-\frac{\partial}{\partial x}(p\frac{\partial u_0}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(p\frac{\partial u_0}{\partial y}) + q u_0 = f, \quad (x,y) \in \Omega \tag{4.5.12}
$$

$$
[p\frac{\partial u_0}{\partial n} + \beta_0(x,y) u_0 = \beta_1(x,y), \quad (x,y) \in \Gamma_2 \tag{4.5.13}
$$

由于 $u_0 \in M$, 故 $u_0|_{\Gamma_1} = \alpha(x,y)$. 因此 u_0 是边值问题 (4.5.1)~(4.5.3) 的解.

□

§4.5.2 差分格式推导

考虑 Poisson 方程边值问题

$$-(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})=f(x,y),\quad (x,y)\in\Omega \tag{4.5.14}$$

$$u|_{\Gamma_1}=\varphi(x,y) \tag{4.5.15}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma_2}=\psi(x,y) \tag{4.5.16}$$

下面从变分原理出法, 将边值问题化成等价的能量极值问题, 然后进行差分离散, 导出差分格式.

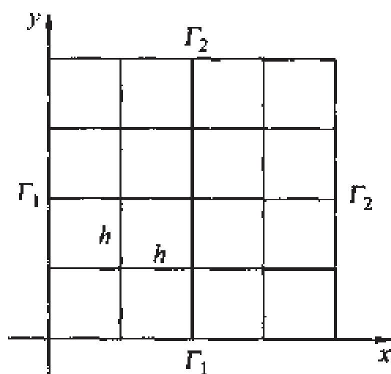


图 4.6 求解区域及边界示意图

由上一小节可知, 边值问题 (4.5.14)~(4.5.16) 等价于如下的变分问题: 求 $u\in H^1(\Omega)$, 且 $u|_{\Gamma_1}=\varphi$ 使得

$$J(u)=\frac{1}{2}a(u,u)-(f,u)-\int_{\Gamma_2}\psi u ds=\min \tag{4.5.17}$$

其中

$$\begin{aligned}a(u,u)&=\int\int_\Omega[(\frac{\partial u}{\partial x})^2+(\frac{\partial u}{\partial y})^2]dxdy\\(f,u)&=\int\int_\Omega fudxdy\end{aligned} \tag{4.5.18}$$

为简单起见, 如图 4.6 所示, 设 Ω 为长方形区域, 并用等步长 h 进行剖分, 得结点 (i,j), $i=0,1,\cdots,M-1$, $j=0,1,\cdots,N-1$. 记每个小正方形单元为

$$\Omega_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}=\{x_i\leqslant x\leqslant x_{i+1},y_j\leqslant y\leqslant y_{j+1}\},\quad i=0,1,\cdots,M-1,\quad j=0,1,\cdots,N-1$$

且

$$\Omega=\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{j=0}^{N-1}\Omega_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$$

同时也把边界 Γ_2 剖分成线单元, 记

$$\partial\Omega_{M,j+\frac{1}{2}} = \{x = x_M, y_j \leqslant y \leqslant y_{j+1}\}$$

$$\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},N} = \{x_i \leqslant x \leqslant x_{j+1}, y = y_N\}$$

$$\Gamma_2 = \sum_{j=0}^{N-1} \partial\Omega_{M,j+\frac{1}{2}} + \sum_{i=0}^{M-1} \partial\Omega_{i+\frac{1}{2},N}$$

于是

$$\begin{aligned} J(u) = &\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{j=0}^{N-1}\int\int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} \left\{\frac{1}{2}[(\frac{\partial u}{\partial x})^2 + (\frac{\partial u}{\partial y})^2] - fu\right\}dxdy \\ &- \sum_{j=0}^{N-1}\int_{\partial\Omega_{M,j+\frac{1}{2}}} \psi u ds - \sum_{i=0}^{M-1}\int_{\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},N}} \psi u ds \end{aligned} \tag{4.5.19}$$

下面近似计算 (4.5.19) 式中的积分

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\int\int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} (\frac{\partial u}{\partial x})^2 dxdy &\approx \frac{h^2}{2}\left\{\frac{1}{2}[(\frac{\partial u}{\partial x})^2_{i+\frac{1}{2},j} + (\frac{\partial u}{\partial x})^2_{i+\frac{1}{2},j+1}]\right\} \\ &\approx \frac{h^2}{2}\left\{\frac{1}{2}[(\frac{u_{i+1,j}-u_{i,j}}{h})^2 + (\frac{u_{i+1,j+1}-u_{i,j+1}}{h})^2]\right\} \\ &= \frac{1}{4}(u_{i+1,j}-u_{i,j})^2 + \frac{1}{4}(u_{i+1,j+1}-u_{i,j+1})^2 \end{aligned} \tag{4.5.20}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\int\int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} (\frac{\partial u}{\partial y})^2 dxdy &\approx \frac{h^2}{2}\left\{\frac{1}{2}[(\frac{\partial u}{\partial y})^2_{i,j+\frac{1}{2}} + (\frac{\partial u}{\partial y})^2_{i+1,j+\frac{1}{2}}]\right\} \\ &\approx \frac{h^2}{2}\left\{\frac{1}{2}[(\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{h})^2 + (\frac{u_{i+1,j+1}-u_{i+1,j}}{h})^2]\right\} \\ &= \frac{1}{4}(u_{i,j+1}-u_{i,j})^2 + \frac{1}{4}(u_{i+1,j+1}-u_{i+1,j})^2 \end{aligned} \tag{4.5.21}$$

用梯形公式近似下面的积分:

$$\int\int_{\Omega_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} fudxdy \approx \frac{h^2}{4}(f_{i,j}u_{i,j} + f_{i+1,j}u_{i+1,j} + f_{i,j+1}u_{i,j+1} + f_{i+1,j+1}u_{i+1,j+1} \tag{4.5.22}$$

$$\int_{\partial\Omega_{M,j+\frac{1}{2}}} \psi u ds \approx \frac{h}{2}(\psi_{M,j}u_{M,j} + \psi_{M,j+1}u_{M,j+1}) \tag{4.5.23}$$

$$\int_{\partial\Omega_{i+\frac{1}{2},N}} \psi u ds \approx \frac{h}{2}(\psi_{i,N}u_{i,N} + \psi_{i+1,N}u_{i+1,N}) \tag{4.5.24}$$

将 (4.5.20)~(4.5.24) 式代入到 (4.5.19) 式中, 得到能量 J 关于 $u_{i,j}(i=1,\cdots,M,\ j=1,\cdots,N)$ 的二次函数

$$
\begin{aligned}
J(u_{i,j}) = &\frac{1}{4}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{j=0}^{N-1}\left[(u_{i+1,j}-u_{i,j})^2+(u_{i+1,j+1}-u_{i,j+1})^2\right.\\
&\left.+(u_{i,j+1}-u_{i,j})^2+(u_{i+1,j+1}-u_{i+1,j})^2\right]\\
&-\frac{h^2}{4}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{j=0}^{N-1}(f_{i,j}u_{i,j}+f_{i+1,j}u_{i+1,j}+f_{i,j+1}u_{i,j+1}+f_{i+1,j+1}u_{i+1,j+1})\\
&-\frac{h}{2}\sum_{j=0}^{N-1}(\psi_{M,j}u_{M,j}+\psi_{M,j+1}u_{M,j+1})-\frac{h}{2}\sum_{i=0}^{M-1}(\psi_{i,N}u_{i,N}+\psi_{i+1,N}u_{i+1,N})\\
&i=1,\cdots,M,\ j=1\cdots,N
\end{aligned}
$$

因此原变分问题化为多元函数的极值问题. 令

$$
\frac{\partial J}{\partial u_{i,j}}=0,\quad i=1,\cdots,M,\quad j=1,\cdots,N \tag{4.5.25}
$$

即形成 $M\times N$ 阶线性代数方程组. 当 (i,j) 为内结点时 $(i=1,\cdots,M-1,\ j=1,\cdots,N-1)$ 由 (4.5.25) 得

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i-1,j})+\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i,j-1})-\frac{h^2}{4}f_{i,j}\\
&+\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i-1,j})+\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i,j+1})-\frac{h^2}{4}f_{i,j}\\
&+\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i+1,j})+\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i,j+1})-\frac{h^2}{4}f_{i,j}\\
&+\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i+1,j})+\frac{1}{2}(u_{i,j}-u_{i,j-1})-\frac{h^2}{4}f_{i,j}=0
\end{aligned}
$$

即

$$
4u_{i,j}-u_{i-1,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j-1}-u_{i,j+1}=h^2f_{i,j} \tag{4.5.26}
$$

当 (i,j) 为右边界点而非角点时, $i=M, j=1,\cdots,N-1$, 由 (4.5.25) 式有

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}(u_{M,j}-u_{M-1,j})+\frac{1}{2}(u_{M,j}-u_{M,j+1})-\frac{h^2}{4}f_{M,j}+\frac{1}{2}(u_{M,j}-u_{M-1,j})&\\
+\frac{1}{2}(u_{M,j}-u_{M,j-1})-\frac{h^2}{4}f_{M,j}-h\psi_{M,j}=0&
\end{aligned}
$$

即

$$
2u_{M,j}-u_{M-1,j}-\frac{1}{2}u_{M,j-1}-\frac{1}{2}u_{M,j+1}=\frac{h^2}{2}f_{M,j}+h\psi_{M,j},\quad j=1,\cdots,N-1 \tag{4.5.27}
$$

当 (i,j) 为上边界点而非角点时, $i=1,\cdots,M-1, j=N$, 有

$$\frac{1}{2}(u_{i,N}-u_{i+1,N})+\frac{1}{2}(u_{i,N}-u_{i,N-1})+\frac{1}{2}(u_{i,N}-u_{i-1,N})+\frac{1}{2}(u_{i,N}-u_{i,N-1})$$
$$=\frac{h^2}{2}f_{i,N}+h\psi_{i,N} \tag{4.5.28}$$

即

$$2u_{i,N}-u_{i,N-1}-\frac{1}{2}u_{i-1,N}-\frac{1}{2}u_{i+1,N}=\frac{h^2}{2}f_{i,N}+h\psi_{i,N},\quad i=1,\cdots,M-1 \tag{4.5.29}$$

当 (i,j) 为角点 (M,N) 时, 有

$$\frac{1}{2}(u_{M,N}-u_{M-1,N})+\frac{1}{2}(u_{M,N}-u_{M,N-1})=\frac{h^2}{4}f_{M,N}+h\psi_{M,N} \tag{4.5.30}$$

即

$$u_{M,N}-\frac{1}{2}u_{M-1,N}-\frac{1}{2}u_{M,N-1}=\frac{h^2}{4}f_{M,N}+h\psi_{M,N},\quad i=1,\cdots,M-1 \tag{4.5.31}$$

(4.5.26)~(4.5.31) 式即是所得的差分格式, 在该格式中, 自然边界条件自动满足.

§4.6 正三角形和正六边形网格

除了在矩形网格和正方形网格上逼近 Laplace 方程或 Possion 方程外, 还可以采用由边长为 h 的正三角形或正六边形甚至正多边形的规则网格上进行差分. 考虑下面的 Possion 方程

$$-\Delta u=-(\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2u}{\partial y^2})=f(x) \tag{4.6.1}$$

如图 4.7, 设 $x^{(0)}$ 是任一内结点, 而 $x^{(i)}(i=1,2\cdots,n)$ 是相邻结点. 从 $x^{(0)}$ 引出 n 条射线通过 $x^{(0)}$ 的相邻结点, 记这些射线为 $l_1,l_2,\cdots,l_n$, 射线 l_i 与 x 轴的夹角记为 $\theta_i=\theta+\frac{2\pi}{n}$, 其中 θ 为初始角度. 引进 u 在 $x^{(0)}$ 沿射线 l_i 的右差商

$$\frac{u(x^{(i)})-u(x^{(0)})}{h},\quad i=1,2,\cdots,n$$

我们将用这些差商的组合即

$$Lu(x^{(0)})=\sum_{i=1}^{n}\frac{u(x^{(i)})-u(x^{(0)})}{h}$$

来近似 $\Delta u(x^{(0)})$. 根据 Taylor 展开, 上式可写成

$$Lu=\sum_{i=1}^{n}(\frac{\partial u}{\partial l_i}+\frac{h}{2}\frac{\partial^2u}{\partial l_i^2}+\frac{h^2}{6}\frac{\partial^3u}{\partial l_i^3}+\frac{h^3}{24}\frac{\partial^4u}{\partial l_i^4}+\frac{h^4}{120}\frac{\partial^5u}{\partial l_i^5})+O(h^5) \tag{4.6.2}$$

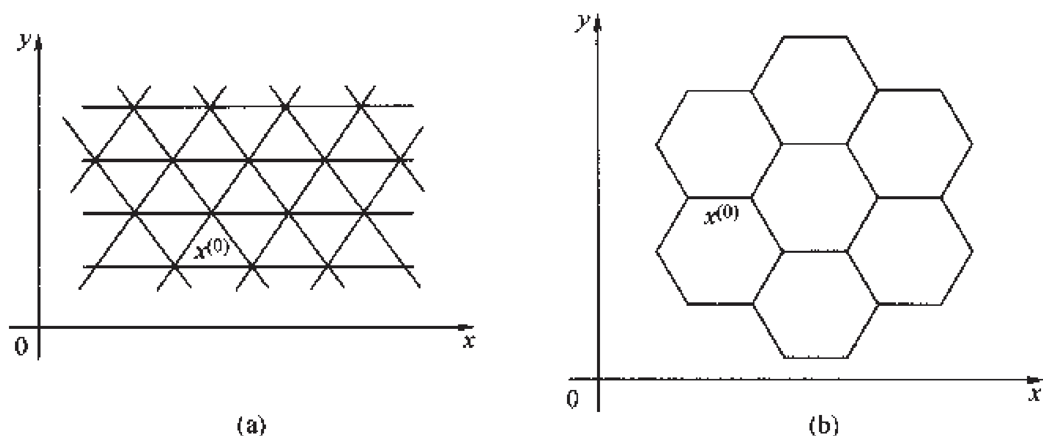


图 4.7 正三角形和正六边形差分网格示意图

下面用 u 关于 x 和 y 的导数来表示 (4.6.2) 中的沿 l_i 的各阶方向导数

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial l_i} &= \cos\theta_i\frac{\partial}{\partial x}+\sin\theta_i\frac{\partial}{\partial y}\\
\frac{\partial^2}{\partial l_i^2} &= \frac{1}{2}\Delta+\frac{1}{2}\cos 2\theta_i(\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial y^2})+\sin 2\theta_i\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\\
\frac{\partial^3}{\partial l_i^3} &= \frac{\cos 3\theta_i}{4}(\frac{\partial^3}{\partial x^3}-3\frac{\partial^3}{\partial x\partial y^2})+\frac{\sin 3\theta_i}{4}(3\frac{\partial^3}{\partial x^2\partial y}-\frac{\partial^3}{\partial y^3})+\frac{3}{4}(\cos\theta_i\frac{\partial}{\partial x}+\sin\theta_i\frac{\partial}{\partial y})\Delta\\
\frac{\partial^4}{\partial l_i^4} &= \frac{3}{8}\Delta^2+\frac{\cos 4\theta_i}{8}(\Delta^2-8\frac{\partial^4}{\partial x^2\partial y^2})+\frac{\sin 4\theta_i}{2}(\frac{\partial^4}{\partial x^3\partial y}-\frac{\partial^4}{\partial x\partial y^3})\\
&\quad+\frac{\cos 2\theta_i}{2}(\frac{\partial^4}{\partial x^4}-\frac{\partial^4}{\partial y^4})+\sin 2\theta_i\frac{\partial^2}{\partial x\partial y})\Delta\\
\frac{\partial^5}{\partial l_i^5} &= \frac{5}{8}(\cos\theta_i\frac{\partial}{\partial x}+\sin\theta_i\frac{\partial}{\partial y})\Delta^2+\frac{5\cos 3\theta_i}{16}(\frac{\partial^5}{\partial x^5}-2\frac{\partial^5}{\partial x^3\partial y^2}-3\frac{\partial^5}{\partial x\partial y^4})\\
&\quad-\frac{5\sin 3\theta_i}{16}(-3\frac{\partial^5}{\partial x^4\partial y}-2\frac{\partial^5}{\partial x^2\partial y^3}+\frac{\partial^5}{\partial y^5})+\frac{\cos 5\theta_i}{16}(\frac{\partial^5}{\partial x^5}+5\frac{\partial^5}{\partial x\partial y^4}-10\frac{\partial^5}{\partial x^3y^2})\\
&\quad+\frac{\sin 5\theta_i}{16}(\frac{\partial^5}{\partial y^5}+5\frac{\partial^5}{\partial x^4\partial y}-10\frac{\partial^5}{\partial x^2y^3})
\end{aligned}
$$

将上述各式代入 (4.6.2) 式中, 并注意

$$
\sum_{i+1}^{n}\cos\alpha\theta_i=\cos\alpha(\theta+\frac{n+1}{n}\pi)\times\begin{cases}\dfrac{\sin\alpha\pi}{\sin\dfrac{\alpha\pi}{n}}, & \dfrac{\alpha}{n}\neq 0,\pm1,\pm2,\cdots,\\(-1)^{\alpha(n+1)/n}n, & \dfrac{\alpha}{n}=0,\pm1,\pm2,\cdots\end{cases}\tag{4.6.3}
$$

$$
\sum_{i+1}^{n}\sin\alpha\theta_i=\sin\alpha(\theta+\frac{n-3}{n}\pi)\times\begin{cases}\dfrac{\sin\alpha\pi}{\sin\dfrac{\alpha\pi}{n}}, & \dfrac{\alpha}{n}\neq 0,\pm1,\pm2,\cdots,\\(-1)^{\alpha(n-1)/n}n, & \dfrac{\alpha}{n}=0,\pm1,\pm2,\cdots\end{cases}\tag{4.6.4}
$$

结果得到

$$Lu = \frac{nh}{4}\Delta u + \frac{nh^3}{64}\Delta^2 u + \delta_{n,3}\frac{h^2}{8}\Big\{\cos 3\theta(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - 3\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial y^2}) + \sin 3\theta(3\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial y} - \frac{\partial^3 u}{\partial y^3})\Big\}$$
$$- \delta_{n,4}\frac{h^3}{48}\Big\{(\Delta^2 u - 8\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2})\cos 4(\theta + \frac{\pi}{4}) + 16(\frac{\partial^4 u}{\partial x^3\partial y} - \frac{\partial^4 u}{\partial x\partial y^3})\sin 4(\theta + \frac{\pi}{4})\Big\}$$
$$+ (\delta_{n,5} + \delta_{n,3}) + O(h^4) + O(h^5), \quad n \geqslant 3 \tag{4.6.5}$$

其中 $\delta_{n,i}$ 是克罗内克符号, 由 (4.6.5) 式推知, 对于任意 $n \geqslant 3$, 算子 L 乘以 $\frac{4}{nh}$ 以后将逼近 Laplace 算子. 因此在正三角形网格上 $(n = 6, \theta = 0)$, 方程 (4.6.2) 的差分格式为

$$-\frac{2}{3h}\sum_{i=1}^{6}\frac{u(x^{(i)} - u(x^{(0)})}{h} = f(x^{(0)}) + \frac{h^2}{16}\Delta f(x^{(0)}) \tag{4.6.6}$$

近似方程的截断误差为 $O(h^4)$, 或

$$-\frac{2}{3h}\sum_{i=1}^{6}\frac{u(x^{(i)}) - u(x^{(0)})}{h} = f(x^{(0)}) \tag{4.6.7}$$

截断误差为 $O(h^2)$. 同理可知, 在正六边形网格上 $(n = 3, \theta = 0或\pi)$, 差分格式为

$$-\frac{4}{3h}\sum_{i=1}^{3}\frac{u(x^{(i)}) - u(x^{(0)})}{h} = f(x^{(0)}) \tag{4.6.8}$$

该格式以误差 $O(h)$ 逼近方程 (4.6.1). 特别地, 对正方形网格剖分 $(n = 4, \theta = 0)$, 差分格式为

$$-\frac{1}{h}\sum_{i=1}^{4}\frac{u(x^{(i)}) - u(x^{(0)})}{h} = f(x^{(0)}) \tag{4.6.9}$$

误差为 $O(h^2)$ 阶, 该格式可变形为

$$4u_{i,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j+1} - u_{i-1,j} - u_{i,j-1} = h^2 f_{i,j}$$

此即 Poisson 方程的五点差分格式.

§4.7 边界条件的处理

前面对一个自变量的两点边值问题的边界条件作了处理, 现在考虑两个自变量的边界条件的差分离散.

§4.7.1 Dirichlet 边界条件

最简单的情况是边界与网格点相交，如前面矩形区域的情况，这时直接在边界结点上取值即可. 当边界与网格点不相交时, 如图 4.8 所示, 这时在结点 O 处的导数可以如下建立. 如要在 O 点处作一阶和二阶导数近似, 根据 Taylor 展开公式, 有

$$u_A = u_O + h\theta_1 \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_O + \frac{1}{2}h^2\theta_1^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_O + O(h^3) \tag{4.7.1}$$

$$u_3 = u_O - h \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_O + \frac{1}{2}h^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_O + O(h^3) \tag{4.7.2}$$

消去 $(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_O$, 得

$$(\frac{\partial u_0}{\partial x})_O = \frac{1}{h}[\frac{1}{\theta_1(1+\theta_1)}u_A - \frac{1-\theta_1}{\theta_1}u_O - \frac{\theta_1}{1+\theta_1}u_3] \tag{4.7.3}$$

其精度为 $O(h^2)$ 阶. 类似地, 如由 (4.7.1) 式和 (4.7.2) 式消去一阶导数 $(\frac{\partial u}{\partial x})_O$, 则导

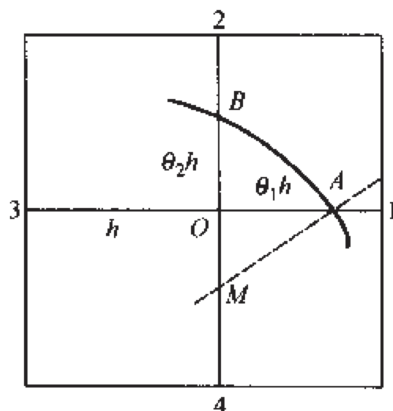


图 4.8　边界与网格点不相交

致

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x})_O = \frac{1}{h^2}[\frac{2}{\theta_1(1+\theta_1)}u_A + \frac{2}{1+\theta_1}u_3 - \frac{2}{\theta_1}u_O] \tag{4.7.4}$$

其精度为 $O(h)$ 阶, 类似地, 可以求得 u 在 O 点处关于 y 的一阶导数和二阶导数, 为

$$(\frac{\partial u}{\partial y})_O = \frac{1}{h^2}[\frac{1}{\theta_2(1+\theta_2)}u_B - \frac{1-\theta_2}{\theta_2}u_O - \frac{\theta_2}{1+\theta_2}u_4]$$

$$(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})_O = \frac{1}{h^2}[\frac{2}{\theta_2(1+\theta_2)}u_B + \frac{2}{1+\theta_2}u_4 - \frac{2}{\theta_2}u_O]$$

于是 Poisson 方程 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y)$ 在点 O 处可近似为

$$\frac{2u_A}{\theta_1(1+\theta_1)} + \frac{2u_B}{\theta_2(1+\theta_2)} + \frac{2u_3}{1+\theta_1} + \frac{2u_4}{1+\theta_2} - 2(\frac{1}{\theta_1} + \frac{1}{\theta_2})u_O = h^2 f_O \tag{4.7.5}$$

其中 u_A, u_B 为 u 在边界上的值, $f_O = f(x_O, y_O)$.

§4.7.2 Neumann 边界条件

考虑 Laplace 方程的 Neumann 边值问题

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0,\quad (x,y)\in\Omega=\{0<x,y<1\} \tag{4.7.6}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega}=g(x,y),\quad (x,y)\in\partial\Omega \tag{4.7.7}$$

其中 $\partial\Omega$ 表示区域 Ω 的边界. 问题 (4.7.6)~(4.7.7) 仅当

$$\int_{\partial\Omega} g(x,y)ds=0$$

时才可解. 为使解唯一, 可指定区域中某点的 u 值. 若取网格步长为 $h=\dfrac{1}{M}$, 则 (4.7.6) 式的差分格式为

$$u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1}-4u_{i,j}=0,\quad i,j=1,\cdots,M \tag{4.7.8}$$

在 $x=0$ 处, (4.7.7) 式的差分格式为

$$u_{-1,j}-u_{1,j}=2hg_{0,j} \tag{4.7.9}$$

其中 $u_{-1,j}$ 是虚网格点, 在 (4.7.8) 式中令 $i=0$(即 $x=0$) 成立, 得

$$u_{1,j}+u_{-1,j}+u_{0,j+1}+u_{0,j-1}-4u_{0,j}=0 \tag{4.7.10}$$

由 (4.7.9) 式和 (4.7.10) 式联立消去 $u_{-1,j}$, 得左边界 $x=0$ 处的二阶精度的差分格式

$$4u_{0,j}-2u_{1,j}-u_{0,j+1}-u_{0,j-1}=2hg_{0,j},\quad j=1,\cdots,M-1 \tag{4.7.11}$$

同理, 对右边界 $x=1$, 有

$$4u_{M,j}-2u_{M-1,j}-u_{M,j+1}-u_{M,j-1}=2hg_{M,j},\quad j=1,\cdots,M-1 \tag{4.7.12}$$

对底边界 $y=0$, 有

$$4u_{i,0}-2u_{i,1}-u_{i+1,0}-u_{i-1,0}=2hg_{i,0},\quad i=1,\cdots,M-1 \tag{4.7.13}$$

对上边界 $y=1$, 有

$$4u_{i,M}-2u_{i,M-1}-u_{i+1,M}-u_{i-1,M}=2hg_{i,M},\quad i=1,\cdots,M-1 \tag{4.7.14}$$

下面对四个角点建立差分格式. 对左下角点 $(i=0,j=0)$, 在方程 (4.7.8) 中令 $i=0,j=0$, 得

$$u_{1,0}+u_{-1,0}+u_{0,1}+u_{0,-1}-4u_{0,0}=0 \tag{4.7.15}$$

再由 $i=0,j=0$ 处边界条件的差分格式

$$u_{0,-1}-u_{0,1}=2hg_{0,0},\quad u_{-1,0}-u_{1,0}=2hg_{0,0} \tag{4.7.16}$$

与 (4.7.15) 式联立消去 $u_{0,-1}$ 和 $u_{-1,0}$ 的左下角的差分格式

$$4u_{0,0}-2u_{1,0}-2u_{0,1}=4hg_{0,0},\quad i=0,j=0 \tag{4.7.17}$$

对右下角点 $(i=M,j=0)$, 在方程 (4.7.8) 中令 $i=M,j=0$, 得

$$u_{M+1,0}+u_{M-1,0}+u_{M,1}+u_{M,-1}-4u_{M,0}=0$$

再由 $i=M,j=0$ 处边界条件的差分格式

$$u_{M+1,0}-u_{M-1,1}=2hg_{M,0},\quad u_{M,-1}-u_{M,1}=2hg_{M,0} \tag{4.7.18}$$

消去 $u_{M+1,0}$ 和 $u_{M,-1}$, 得右下角的差分格式

$$4u_{M,0}-2u_{M-1,0}-2u_{M,1}=4hg_{M,0},\quad i=M,j=0 \tag{4.7.19}$$

对左上角点 $i=0,j=M$, 在方程 (4.7.8) 中令 $i=0,j=M$, 得

$$u_{1,M}+u_{-1,M}+u_{0,M+1}+u_{0,M-1}-4u_{0,M}=0$$

再由 $i=0,j=M$ 处边界条件的差分格式

$$u_{-1,M}-u_{1,M}=2hg_{0,M},\quad u_{0,M+1}-u_{0,M-1}=2hg_{0,M} \tag{4.7.20}$$

消去 $u_{-1,M}$ 和 $u_{0,M-1}$, 的右下角的差分格式

$$4u_{0,M}-2u_{0,M-1}-2u_{1,M}=4hg_{0,M},\quad i=0,j=M \tag{4.7.21}$$

对右上角点 $i=M,j=M$, 在方程 (4.7.8) 中令 $i=M,j=M$, 得

$$u_{M+1,M}+u_{M-1,M}+u_{M,M+1}+u_{M,M-1}-4u_{M,M}=0$$

再由 $i=M,j=M$ 处边界条件的差分格式

$$u_{M+1,M}-u_{M-1,M}=2hg_{M,M},\quad u_{M,M+1}-u_{M,M-1}=2hg_{M,M} \tag{4.7.22}$$

消去 $u_{M+1,M}$ 和 $u_{M,M-1}$, 得右下角的差分格式

$$4u_{M,M}-2u_{M-1,M}-2u_{M,M-1}=4hg_{M,M},\quad i=M,j=M \tag{4.7.23}$$

最后由 (4.7.8)式、(4.7.11)~(4.7.14) 式和 (4.7.17)~(4.7.23) 式构成矩阵方程

$$AU=2hG \tag{4.7.24}$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} B & -2I & & & \\ -I & B & -I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -I & B & -I \\ & & & -2I & B \end{bmatrix}_{(M+1)\times(M+1)},$$

$$B = \begin{bmatrix} 4 & -2 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -2 & 4 \end{bmatrix}_{(M+1)\times(M+1)} \tag{4.7.25}$$

$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 分别为

$$\mathbf{U} = (\boldsymbol{U}_0, \boldsymbol{U}_1, \cdots, \boldsymbol{U}_{M-1}, \boldsymbol{U}_M)^T$$
$$\boldsymbol{U}_i = (u_{0,i}, \cdots, u_{M,i}), \quad i = 0, 1, \cdots, M-1, M$$
$$\boldsymbol{G} = (\boldsymbol{G}_0, \boldsymbol{G}_1, \cdots, \boldsymbol{G}_{M-1}, \boldsymbol{G}_M)^T$$
$$\boldsymbol{G}_0 = (2g_{0,0}, g_{1,0}, \cdots, g_{M-1,0}, 2g_{M,0})$$
$$\boldsymbol{G}_i = (g_{0,i}, \cdots, g_{M,i}), \quad i = 1, \cdots, M-1$$
$$\boldsymbol{G}_M = (2g_{0,M}, g_{1,M}, \cdots, g_{M-1,M}, 2g_{M,M})$$

§4.7.3 Robbins 边界条件

考虑如下混合边值问题

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad (x, y) \in \Omega = \{0 < x, y < 1\} \tag{4.7.26}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} - p(y)u = f(y), \quad x = 0, \ 0 \leqslant y \leqslant 1 \tag{4.7.27}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} - q(x)u = g(x), \quad y = 0, \ 0 \leqslant x \leqslant 1 \tag{4.7.28}$$

$$u = \gamma(x, y) = \begin{cases} x = 1, & 0 \leqslant y \leqslant 1 \\ y = 1, & 0 \leqslant x \leqslant 1 \end{cases} \tag{4.7.29}$$

其中 p, q, f, g, γ 均是已知函数. 取 $h = \frac{1}{M}$, 则 (4.7.26) 式的差分方程仍为 (4.7.8), 式即

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} = 0, \quad i, j = 1, \cdots, M$$

下面考虑边界条件的差分格式, 对边界 $x=0$, (4.7.27) 式的差分格式为

$$(u_{1,j}-u_{-1,j})-2hp_ju_{0,j}=2hf_j \tag{4.7.30}$$

结合 (4.7.8) 式在 $x=0$ 处的差分方程, 联立消去 $u_{-1,j}$, 得 $x=0$ 时的差分格式

$$2u_{1,j}+u_{0,j+1}+u_{0,j-1}-(4+2hp_j)u_{0,j}=2hf_j,\quad j=1,\cdots,M-1;i=0 \tag{4.7.31}$$

类似地对边界 $y=0$, (4.7.28) 式的差分格式为

$$(u_{i,1}-u_{i,-1})-2hq_iu_{i,0}=2hg_i,\quad j=1,\cdots,M-1 \tag{4.7.32}$$

再结合 (4.7.8) 式在 $y=0$ 处的差分方程, 联立消去 $u_{i,-1}$, 得 $y=0$ 时的差分格式

$$2u_{i,1}+u_{i+1,0}+u_{i-1,0}-(4+2hq_i)u_{i,0}=2hg_i,\quad i=1,\cdots,M-1;j=0 \tag{4.7.33}$$

对第一类边界条件 (4.7.29), 有

$$\begin{aligned}u_{M,j}&=\gamma_{M,j},\quad j=0,1,\cdots,M\\ u_{i,M}&=\gamma_{i,M},\quad i=0,1,\cdots,M\end{aligned} \tag{4.7.34}$$

在左下角点 $(i=0,j=0)$ 处, 令方程 (4.7.8) 及 (4.7.30) 式和 (4.7.32) 式也都成立, 得

$$u_{-1,0}+u_{1,0}+u_{0,1}+u_{0,-1}-4u_{0,0}=0 \tag{4.7.35}$$

$$u_{1,0}-u_{-1,0}-2hp_0u_{0,0}=2hf_0 \tag{4.7.36}$$

$$u_{0,1}-u_{0,-1}-2hq_0u_{0,0}=2hg_0 \tag{4.7.37}$$

由上面三式联立消去 $u_{0,-1}$ 和 $u_{-1,0}$ 得角点 $(i=0,j=0)$ 处的差分方程为

$$2u_{1,0}+2u_{0,1}-(4+2hp_0+2hq_0)u_{0,0}=2h(f_0+g_0) \tag{4.7.38}$$

于是由 (4.7.8) 式、(4.7.31)~(4.7.33) 式及 (4.7.38) 式可形成 M^2 个未知数的线性代数方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=h\boldsymbol{G}$$

其中 A 是 M 阶块三对角矩阵

$$A=\begin{bmatrix}E_0 & F & & & \\ F & E_1 & F & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & F & E_{M-2} & F\\ & & & F & E_{M-1}\end{bmatrix}_{M\times M}$$

其中

$$E_0=\begin{bmatrix} -[1+h(p_0+q_0)/2] & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & -(2+hq_1) & \frac{1}{2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{1}{2} & -(2+hq_{M-2}) & \frac{1}{2} \\ & & & \frac{1}{2} & -(2+hq_{M-1}) \end{bmatrix}_{M\times M}$$

$$E_m=\begin{bmatrix} -(2+hp_m) & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -4 & 1 \\ & & & 1 & -4 \end{bmatrix}_{M\times M} \qquad (m=1,2,\cdots,M-1)$$

F 是 M 阶三对角阵 $\mathrm{diag}(\frac{1}{2},1,\cdots,1)$,

$$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{U}_0,\boldsymbol{U}_1,\cdots,\boldsymbol{U}_{M-1})^T$$

其中 $\boldsymbol{U}_0,\cdots,\boldsymbol{U}_{M-1}$ 均为 M 维向量:

$$\boldsymbol{U}_j=(u_{0,j},u_{1,j},\cdots,u_{M-1,j}),\quad j=0,\cdots,M-1$$

$$\boldsymbol{G}=(\boldsymbol{G}_0,\boldsymbol{G}_1,\cdots,\boldsymbol{G}_{M-1})^T$$

其中 $\boldsymbol{G}_0,\cdots,\boldsymbol{G}_{M-1}$ 均为 M 维向量

$$\boldsymbol{G}_0=(\frac{h(f_0+g_0)}{2},hg_1,\cdots,hg_{M-2},hg_{M-1}-\frac{1}{2}\gamma_{M,0})$$

$$\boldsymbol{G}_{M-1}=(hf_{M-1}-\frac{1}{2}\gamma_{0,M},-\gamma_{1,M},\cdots,-\gamma_{M-2,M},-\gamma_{M-1,M})$$

$$\boldsymbol{G}_j=(hf_j,0,\cdots,0,-\gamma_{M,j}),\quad j=1,\cdots,M-2$$

如果 Neumann 或 Robbins 边界条件中的法向不平行于网格线, 如图 4.8 所示. 这时 u_A 的值可从 $(\frac{\partial u}{\partial n})_A$ 近似得到:

$$(\frac{\partial u}{\partial n})_A\approx\frac{u_A-u_M}{\overline{MA}}$$

而 u_M 由 u_O 与 u_4 线性插值得到

$$u_M\approx\frac{\overline{OM}}{h}u_4+\frac{h-\overline{OM}}{h}u_O$$

于是

$$u_B=\frac{\overline{OM}}{h}u_4+\frac{h-\overline{OM}}{h}u_O+\overline{MA}(\frac{\partial u}{\partial n})_A$$

§4.8 差分格式的收敛性分析

考虑具有 Dirchlet 边界条件的 Poisson 方程

$$-\nabla^2 u = g(x,y), \quad (x,y) \in \Omega = (0,1)\times(0,1) \tag{4.8.1}$$

$$u|_{\partial\Omega} = f(x,y), \quad (x,y)\in\partial\Omega \tag{4.8.2}$$

的五点差分格式的收敛性. 设 $\Delta x = \dfrac{1}{M_x}$ 和 $\Delta y = \dfrac{1}{M_y}$ 分别为 x 和 y 方向上的步长. 该问题的五点差分格式为

$$L_{i,j}u_{i,j} = -\frac{1}{\Delta x^2}\delta_x^2 u_{i,j} - \frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2 u_{i,j} = g_{i,j} \tag{4.8.3}$$
$$i=1,\cdots,M_x-1,\ j=1,\cdots,M_y-1$$

$$u_{0,j} = f_{0,j}, \quad j=1,\cdots,M_y-1 \tag{4.8.4}$$

$$u_{M_x,j} = f_{M_x,j}, \quad j=1,\cdots,M_y-1 \tag{4.8.5}$$

$$u_{i,0} = f_{i0}, \quad i=1,\cdots,M_x-1 \tag{4.8.6}$$

$$u_{i,M_y} = f_{i,M_y}, \quad i=1,\cdots,M_x-1 \tag{4.8.7}$$

该格式是对问题 (4.8.1)~(4.8.2) 的 $O(\Delta x^2)+O(\Delta y^2)$ 精度近似. 假如差分方程 (4.8.3)~(4.8.7) 的未知量以如下方式排序

$$\boldsymbol{u} = (u_{1,1},\cdots,u_{M_x,1},u_{1,2},\cdots,u_{M_x-1,M_y-1})^T$$

则可写成矩阵形式

$$A\boldsymbol{U} = \boldsymbol{G}$$

其中 $\boldsymbol{G}$ 是已知列向量, A 的形式为

$$A = \begin{bmatrix} B & -\frac{1}{\Delta y^2}I & & & \\ -\frac{1}{\Delta y^2}I & B & -\frac{1}{\Delta y^2}I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\frac{1}{\Delta y^2}I & B & -\frac{1}{\Delta y^2}I \\ & & & -\frac{1}{\Delta y^2}I & B \end{bmatrix}_{(M_y-1)\times(M_y-1)} \tag{4.8.8}$$

其中 B 是 $(M_x-1)\times(M_x-1)$ 矩阵

$$\begin{bmatrix} 2(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}) & -\frac{1}{\Delta x^2} & & & \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & 2(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}) & -\frac{1}{\Delta x^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & -\frac{1}{\Delta x^2} & 2(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}) & -\frac{1}{\Delta x^2} \\ & & -\frac{1}{\Delta x^2} & 2(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}) \end{bmatrix}_{(M_x-1)\times(M_x-1)} \tag{4.8.9}$$

由于 A 是对称正定矩阵, 所以 A 是可逆的, 因此问题 (4.8.3)~(4.8.7) 有唯一解. 或者我们根据 A 的不可约对角占优也知 A 是可逆的.

下面讨论差分解的收敛性. 设 v 是问题 (4.8.1)~(4.8.2) 的解, $\boldsymbol{u}=\{u_{i,j}\}(i=0,\cdots,M_x,\ j=0,\cdots,M_y)$ 是问题 (4.8.3)~(4.8.7) 的解. 设 G_Ω 表示区域 Ω 的网格点, G_Ω^0 和 ∂G_Ω 分别表示区域 Ω 的内部网格点和边界网格点. 定义 G_Ω, G_Ω^0 和 ∂G_Ω 上的网格函数的上确界范数

$$||\boldsymbol{u}||_\infty=\max|u_{i,j}|,\quad (i,j)\in G_\Omega \tag{4.8.10}$$

$$||\boldsymbol{u}||_{\infty 0}=\max|u_{i,j}|,\quad (i,j)\in G_\Omega^0 \tag{4.8.11}$$

$$||\boldsymbol{u}||_{\infty 0G_\Omega}=\max|u_{i,j}|,\quad (i,j)\in \partial G_R \tag{4.8.12}$$

下面证明离散极大值原理 (离散极小值原理完全类同).

命题 4.8.1 (离散极大值原理) 假如在 G_Ω^0 上

$$L_{i,j}u_{i,j}=-(\frac{1}{\Delta x^2}\delta_x^2+\frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2)u_{i,j}\leqslant 0$$

$(L_{i,j}u_{i,j}\geqslant 0)$, 则 $u_{i,j}$ 在 G_Ω 上的极大值 (极小值) 只能在边界 ∂G_Ω 上达到.

证明 假定 $u_{i,j}$ 是 G_Ω^0 上的一个局部极大值, 即

$$u_{i,j}\geqslant u_{i+1,j},\quad u_{i,j}\geqslant u_{i-1,j},\quad u_{i,j}\geqslant u_{i,j+1},\quad u_{i,j}\geqslant u_{i,j-1}$$

且其中至少有一个大于号成立, 则

$$\begin{aligned} L_{i,j}u_{i,j}&=\frac{2u_{i,j}-u_{i+1,j}-u_{i-1,j}}{\Delta x^2}+\frac{2u_{i,j}-u_{i,j+1}-u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \\ &>\frac{u_{i+1,j}+u_{i-1,j}-u_{i+1,j}-u_{i-1,j}}{\Delta x^2}+\frac{u_{i,j+1}+u_{i,j-1}-u_{i,j+1}-u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \end{aligned}$$

这与条件 $L_{i,j}u_{i,j}\leqslant 0$ 矛盾. 故 $u_{i,j}$ 在 G_Ω 上的极大值只能在 ∂G_Ω 上出现. 极小值情况类似.

□

命题 4.8.2 假定 $u_{i,j}(i=0,\cdots,M_x,j=0,\cdots,M_y)$ 是 G_Ω 上的一个网格函数，且 $u_{0,j}=u_{M_x,j}=u_{i,0}=u_{i,M_y}=0$，则

$$||\boldsymbol{u}||_\infty \leqslant \frac{1}{8}||L_{i,j}u_{i,j}||_{\infty 0} \tag{4.8.13}$$

其中 $\boldsymbol{u}$ 表示由 $u_{i,j}$ 构成的向量.

证明 考虑定义在 G_Ω 上的一个网格函数 $u_{i,j}$，且在 ∂G_Ω 上满足 $u_{i,j}=0$. 定义 G_Ω^0 上的网格函数

$$S_{i,j}=L_{i,j}u_{i,j}, \quad (i,j)\in G_\Omega^0$$

显然

$$-||S||_{\infty 0} \leqslant L_{i,j}u_{i,j} \leqslant ||S||_{\infty 0} \tag{4.8.14}$$

其中 $S=\{S_{i,j}\}$. 定义

$$w_{i,j}=\frac{1}{4}[(x_i-\frac{1}{2})^2+(y_j-\frac{1}{2})^2]$$

注意

$$L_{i,j}w_{i,j}=-1$$

于是由不等式 (4.8.14) 知

$$L_{i,j}(u_{i,j}-||S||_{\infty 0}w_{i,j})=L_{i,j}u_{i,j}-||S||_{\infty 0}L_{i,j}w_{i,j}=L_{i,j}u_{i,j}+||S||_{\infty 0}\geqslant 0$$

同理，有

$$L_{i,j}(u_{i,j}+||S||_{\infty 0}w_{i,j})\leqslant 0$$

因此 $u-||S||_{\infty 0}w$ 的极小值和 $u+||S||_{\infty 0}w$ 的极大值均出现在边界 ∂G_Ω 上. 于是

$$\begin{aligned}\max_{\partial G_\Omega}[\boldsymbol{u}+||S||_{\infty 0}w] &= ||S||_{\infty 0}||w||_{\infty\partial G_\Omega}\\ &\geqslant u_{i,j}+||S||_{\infty 0}w_{i,j}\\ &\geqslant u_{i,j}, \quad (i,j)\in G_\Omega\end{aligned}$$

或

$$-||S||_{\infty 0}||w||_{\infty\partial G_\Omega}\leqslant u_{i,j}\leqslant ||S||_{\infty 0}||w||_{\infty\partial G_\Omega}$$

因为 $||w||_{\infty\partial G_\Omega}=\dfrac{1}{8}$，所以

$$||u||_\infty \leqslant \frac{1}{8}||L_{i,j}u_{i,j}||_{\infty 0}$$

□

由命题 4.8.2 可以证明下面收敛性定理.

定理 4.8.1 设 $v \in C^4(\overline{R})$ 是问题 (4.8.1)~(4.8.2) 的解, $u_{i,j}$ 是差分方程 (4.8.3)~(4.8.7) 的解, 则

$$||\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}||_\infty \leqslant C(\Delta x^2+\Delta y^2)||\partial^4 v||_{\infty 0} \tag{4.8.15}$$

其中

$$||\partial^4 v||_{\infty 0} = \sup|\frac{\partial^4 v(x,y)}{\partial x^p \partial y^q}|, \quad (x,y)\in\Omega^0, p+q=4,\ p,q=0,\cdots,4. \tag{4.8.16}$$

Ω^0 是 Ω 的内部,

证明 注意 $||\partial^4 v||_{\infty 0}$ 是在区域 G 的内部上计算的四阶导数的极大值. 设 v 是偏微分方程 (4.8.1)~(4.8.2) 的解, 由相容性条件, $v_{i,j}$ 满足

$$L_{i,j}v_{i,j} = g_{i,j} + O(\Delta x^2) + O(\Delta y^2) \tag{4.8.17}$$

且截断误差首项为 $-\frac{1}{12}(\Delta x^4\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}+\Delta y^4\frac{\partial^4 v}{\partial y^4})_{i,j}$. 因为 $u_{i,j}$ 满足

$$L_{i,j}u_{i,j} = g_{i,j} \tag{4.8.18}$$

(4.8.17) 式减 (4.8.18) 式得

$$L_{i,j}(v_{i,j}-u_{i,j}) = O(\Delta x^2+\Delta y^2)$$

或

$$||L_{i,j}(v_{i,j}-u_{i,j})||_{\infty 0} \leqslant \frac{1}{12}(\Delta x^2+\Delta y^2)||\partial^4 v||_{\infty 0}$$

又在 ∂G_Ω 上 $v_{i,j}-u_{i,j}=0$, 于是根据命题 4.8.2 有

$$||\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}||_\infty \leqslant \frac{1}{16}(\Delta x^2+\Delta y^2)||\partial^4 v||_{\infty 0}$$

即

$$||\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}||_\infty \leqslant C(\Delta x^2+\Delta y^2)||\partial^4 v||_{\infty 0}$$

□

该定理表明 Poission 方程第一边值问题 5 点差分格式的解收敛于问题本身的解.

§4.9 极坐标下 Poission 方程的差分格式

本节简要讨论极坐标下 Poission 方程的差分格式. 分别考虑二维圆环区域和圆盘区域两种情况.

1. 圆环型区域

$$-\nabla^2 u = g(r,\theta), R_a = \{(r,\theta) : R_i < r < 1, 0 \leqslant \theta < 2\pi\} \tag{4.9.1}$$

$$u(R_i,\theta) = f_1(\theta), \quad \theta \in [0, 2\pi] \tag{4.9.2}$$

$$u(1,\theta) = f_2(\theta), \quad \theta \in [0, 2\pi] \tag{4.9.3}$$

其中 Laplace 算子 ∇^2 在极坐标系下为

$$\nabla^2 u = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial u}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \tag{4.9.4}$$

这里给出的是 Dirchlet 边界条件 $r = R_i$ 和 $r = 1$ 上的值, 但方法可扩展到 Neumann 和混合边值问题.

取步长 $\Delta r = \frac{1}{M_r}$, $\Delta\theta = \frac{2\pi}{M_\theta}$, 得网格 (r_i, θ_j), $i = 0, \cdots, M_r$, $j = 0, \cdots, M_\theta$, 则 (4.9.1)~(4.9.3) 式的差分格式为

$$-\frac{1}{r_i\Delta r^2}[r_{i+1/2}(u_{i+1,j} - u_{i,j}) - r_{i-1/2}(u_{i,j} - u_{i-1,j})] - \frac{1}{r_i^2\Delta\theta^2}\delta_\theta^2 u_{i,j} = g_{i,j}$$

$$i = 1, \cdots, M_r - 1,\ j = 1, \cdots, M_\theta - 1 \tag{4.9.5}$$

$$-\frac{1}{r_i\Delta r^2}[r_{i+1/2}(u_{i+1,0} - u_{i,0}) - r_{i-1/2}(u_{i,0} - u_{i-1,0})]$$

$$-\frac{1}{r_i^2\Delta\theta^2}(u_{i,1} - 2u_{i,0} + u_{i,M_\theta-1}) = g_{i,0}, \quad i = 1, \cdots, M_r - 1; j = 0 \tag{4.9.6}$$

$$u_{i,M_\theta} = u_{i,0}, \quad i = 0, \cdots, M_r \tag{4.9.7}$$

$$u_{0,j} = f_1(\theta_j), \quad j = 0, \cdots, M_\theta \tag{4.9.8}$$

$$u_{M_r,j} = f_2(\theta_j), \quad j = 0, \cdots, M_\theta \tag{4.9.9}$$

注意当 $j = 0$ 和 $j = M_\theta$ 时, θ_j 的差分格式是一样的. (4.9.7) 式表示周期性边界条件.

方程 (4.9.5)~(4.9.9) 可写成矩阵形式

$$\boldsymbol{AU} = \boldsymbol{F} \tag{4.9.10}$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 是共有 $(M_r - 1) \times M_\theta$ 个未知量的列向量,

$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{U}_1, \cdots, \boldsymbol{U}_{M_r-1})^T$$

$$\boldsymbol{U}_i = (u_{i,0}, u_{i,0}, u_{i,0}, \cdots, u_{i,M_\theta-1}), \quad i = 1, \cdots, M_r - 1$$

矩阵 A 为 M_r-1 阶块三对角方阵

$$A=\begin{bmatrix} T_1 & -\gamma_1 I & & & \\ -\alpha_2 I & T_2 & -\gamma_2 I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\alpha_{M_r-2} I & T_{M_r-2} & -\gamma_{M_r-2} I \\ & & & -\alpha_{M_r-1} I & T_{M_r-1} \end{bmatrix}_{(M_r-1)\times(M_r-1)}$$

其中

$$T_i=\begin{bmatrix} \beta_i & -\varepsilon_i & \cdots & -\varepsilon_i & \\ -\varepsilon_i & \beta_i & -\varepsilon_i & & \\ & -\varepsilon_i & \beta_i & -\varepsilon_i & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -\varepsilon_i & \beta_i & -\varepsilon_i \\ -\varepsilon_i & & & -\varepsilon_i & \beta_i \end{bmatrix}$$

$$\alpha_i=\frac{r_{i-1/2}}{r_i\Delta r^2},\quad i=2,\cdots,M_r-1$$
$$\gamma_i=\frac{r_{i+1/2}}{r_i\Delta r^2},\quad i=1,\cdots,M_r-2$$
$$\beta_i=\frac{r_{i-1/2}+r_{i+1/2}}{r_i\Delta r^2}+\frac{2}{r_i^2\Delta\theta^2},$$
$$\varepsilon_i=\frac{1}{r_i^2\Delta\theta^2},\quad i=2,\cdots,M_r-1$$

其中 I 是 M_θ 阶单位矩阵, 右端列向量为

$$\boldsymbol{F}=(\boldsymbol{f}_1,\cdots,\boldsymbol{f}_{M_r-1})^T$$

$$\boldsymbol{f}_1=\begin{bmatrix} g_{1,0}+\alpha_1 f_1(\theta_0) \\ g_{1,1}+\alpha_1 f_1(\theta_1) \\ \vdots \\ g_{1,M_\theta-1}+\alpha_1 f_1(\theta_{M_\theta-1}) \end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{f}_{M_r-1}=\begin{bmatrix} g_{M_r-1,0}+\gamma_{M_r-1} f_2(\theta_0) \\ g_{M_r-1,1}+\gamma_{M_r-1} f_2(\theta_1) \\ \vdots \\ g_{M_r-1,M_\theta-1}+\gamma_{M_r-1} f_2(\theta_{M_\theta-1}) \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{f}_i=\begin{bmatrix} g_{i,0} \\ g_{i,1} \\ \vdots \\ g_{i,M_\theta-1} \end{bmatrix},\quad i=2,\cdots,M_r-2$$

矩阵 A 的系数具有对角占优性, 因为

$$|a_{ii}| = \sum_{j=1,j\neq i}^{(M_r-1)\times(M_\theta-1)} |a_{ij}|, \quad i = 2,\cdots,M_r-2$$

$$|a_{11}| > \sum_{j=2}^{(M_r-1)\times(M_\theta-1)} |a_{1j}|$$

$$|a_{M_r-1,M_r-1}| > \sum_{j=1}^{(M_r-1)\times(M_\theta-1)} |a_{M_r-1,j}|$$

且 A 不可约, 因此 A 可逆, 方程 (4.9.10) 有唯一解.

2. 圆盘型区域

$$-\nabla^2 v = F(r,\theta), \quad R_d = \{(r,\theta): 0 \leqslant r < 1, 0 \leqslant \theta \leqslant 2\pi\} \tag{4.9.11}$$

$$v(1,\theta) = f_2(\theta), \quad \theta \in [0,2\pi] \tag{4.9.12}$$

该方程的差分格式如下

$$\begin{aligned}&-\frac{1}{r_i\Delta x^2}[r_{i+1/2}(u_{i+1,j}-u_{i,j})-r_{i-1/2}(u_{i,j}-u_{i-1,j})]\\&-\frac{1}{r_i^2\Delta\theta^2}\delta_\theta^2 u_{i,j}=g_{i,j}, \quad i=1,\cdots,M_r-1,\ j=1,\cdots,M_\theta-1\end{aligned} \tag{4.9.13}$$

$$\begin{aligned}&-\frac{1}{r_i\Delta x^2}[r_{i+1/2}(u_{i+1,0}-u_{i,0})-r_{i-1/2}(u_{i,0}-u_{i-1,0})]\\&-\frac{1}{r_i^2\Delta\theta^2}(u_{i,1}-2u_{i,0}+u_{i,M_\theta-1})=g_{i,0}, \quad i=1,\cdots,M_r-1;\ j=0\end{aligned} \tag{4.9.14}$$

$$u_{i,M_\theta} = u_{i,0}, i = 0,\cdots,M_r \tag{4.9.15}$$

$$\frac{4}{\Delta r^2}u_0 - \frac{2\Delta\theta}{\pi\Delta r^2}\sum_{j=0}^{M_\theta-1} u_{1,j} = g_0 \tag{4.9.16}$$

$$u_{M_r,j} = f_2(\theta_j), \quad j = 0,\cdots,M_\theta \tag{4.9.17}$$

(4.9.13)~(4.9.17) 式可写成形式

$$A\boldsymbol{U} = \boldsymbol{F} \tag{4.9.18}$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 是有 $M_\theta(M_r-1)+1$ 个未知量的列向量

$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2, \cdots, \boldsymbol{U}_{M_r-1}), \quad \boldsymbol{U}_0 = (u_0)$$

$$\boldsymbol{U}_i = (u_{i,0}, u_{i,1}, u_{i,2}, \cdots, u_{i,M_\theta-1}), \quad i = 1,\cdots,M_r-1$$

矩阵 A 为

$$A=\begin{bmatrix}\alpha & T & \theta^T & & & \\ T & T_1 & -\gamma_1 I & & & \\ & -\alpha_2 I & T_2 & -\gamma_2 I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & -\alpha_{M_r-2}I & T_{M_r-2} & -\gamma_{M_r-2}I \\ & & & -\alpha_{M_r-1}I & T_{M_r-1}\end{bmatrix} \tag{4.9.19}$$

其中

$$\alpha=\frac{4}{\Delta r^2}$$

$$\alpha_i=\frac{r_{i-1/2}}{r_i\Delta r^2},\quad \gamma_i=\frac{r_{i+1/2}}{r_i\Delta r^2}$$
$$\beta_i=\frac{r_{i-1/2}+r_{i+1/2}}{r_i\Delta r^2}+\frac{2}{r_i^2\Delta\theta^2},\quad \varepsilon_i=\frac{1}{r_i^2\Delta r^2}$$

$$T_i=\begin{bmatrix}\beta_i & -\varepsilon_i & & \cdots & -\varepsilon_i \\ -\varepsilon_i & \beta_i & -\varepsilon_i & & \\ & -\varepsilon_i & \beta_i & -\varepsilon_i & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\varepsilon_i & \beta_i & -\varepsilon_i \\ -\varepsilon_i & \cdots & & -\varepsilon_i & \beta_i\end{bmatrix}_{M_\theta\times M_\theta},\quad i=1,2,\cdots,M_r-1$$

右端列向量 $\boldsymbol{F}$ 为

$$\boldsymbol{F}=(\boldsymbol{f}_0,\boldsymbol{f}_1,\cdots,\boldsymbol{f}_{M_r-1})^T$$

$$\boldsymbol{f}_i=\begin{bmatrix}g_{i,0}\\ g_{i,1}\\ \vdots \\ g_{i,M_\theta-1}\end{bmatrix},\quad i=1,\cdots,M_r-2.\quad \boldsymbol{f}_0=(g_0)$$

$$\boldsymbol{f}_{M_r-1}=\begin{bmatrix}g_{M_r-1,0}+\gamma_{M_r-1}f_2(\theta_0)\\ g_{M_r-1,1}+\gamma_{M_r-1}f_2(\theta_1)\\ \vdots \\ g_{M_r-1,M_\theta-1}+\gamma_{M_r-1}f_2(\theta_{M_\theta-1})\end{bmatrix}$$

注意 A 中的元素 a_{11} 子块是 1×1 阶矩阵, a_{12} 子块 S 是 $1\times M_\theta$ 阶矩阵, a_{21} 子块 $\boldsymbol{T}$ 是 $M_\theta\times 1$ 阶矩阵, 其余元素子块均为 $M_\theta\times M_\theta$ 矩阵. 未知数 u_0 表示 $r=0$ 时 (对所有 θ) 的 u 值.

同理可验证, 系数矩阵 A 满足主对角占优性, 因为

$$|a_{ii}| = \sum_{j=1,j\neq i}^{M_\theta(M_r-1)+1} |a_{ij}| = \alpha_i + 2\varepsilon_i + \gamma_i$$
$$= \frac{2}{\Delta r^2} + \frac{2}{r_i^2\Delta\theta^2}, \quad i = 2,\cdots,M_\theta(M_r-1)+1$$

对第一行

$$|a_{11}| = \frac{4}{\Delta r^2}$$
$$\sum_{j=2}^{M_\theta(M_r-1)+1} |a_{1j}| = M_\theta\frac{2\Delta\theta}{\pi\Delta r^2} = \frac{2M_\theta\Delta\theta}{\pi\Delta r^2} = \frac{4}{\Delta r^2}$$

又 A 不可约, 因此问题 (4.9.13)~(4.9.17) 唯一可解.

由上可知, 圆盘型区域的 Poisson 方程第一边值问题比圆环型区域的 Poisson 方程第一边值问题多一个方程, 即关于圆心的方程. 下面说明如何建立圆心处的差分格式, 即 (4.9.16) 式.

首先根据第一 Green 公式, 易知

$$\int\int_\Omega \Delta u dxdy = \int_{\partial\omega}\frac{\partial u}{\partial n}ds \tag{4.9.20}$$

其中 Δ 为 Laplace 算子,n 为 Ω 的边界 $\partial\Omega$ 的外法线方向. 由此得到 (极坐标的散度定理)

$$\int\int_\Omega[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial u}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2}]rdrd\theta = \int_{\partial\Omega}\frac{\partial u}{\partial n}ds \tag{4.9.21}$$

取积分区域 Ω 为圆心 0 半径为 $\frac{\Delta r}{2}$ 的圆形域, 则

$$\int_{\partial\Omega}\frac{\partial u}{\partial n}ds = \int_0^{2\pi}\frac{\partial u}{\partial r}|_{r=\frac{\Delta r}{2}}(\frac{\Delta r}{2}d\theta) = \frac{\Delta r}{2}\int_0^{2\pi}\frac{\partial u}{\partial r}|_{r=\frac{\Delta r}{2}}dr \tag{4.9.22}$$

在该区域 Ω 上对方程 (4.9.11) 两端积分, 并利用 (4.9.22) 和 (4.9.22), 得

$$-\frac{\Delta r}{2}\int_0^{2\pi}\frac{\partial u}{\partial r}|_{r=\frac{\Delta r}{2}}d\theta = \int_0^{2\pi}\int_0^{\frac{\Delta r}{2}} g(r,\theta)rdrd\theta$$

对左端的积分采样矩形公式近似, 右端积分采用中矩形公式近似, 得

$$-\frac{\Delta r}{2}\sum_{j=0}^{M_\theta-1}\frac{\partial u(\frac{\Delta r}{2},\theta_j)}{\partial r}\Delta\theta = \frac{\pi\Delta r^2}{4}g_0$$

进一步近似得

$$-\frac{\Delta r\Delta\theta}{2}\sum_{j=0}^{M_\theta-1}\frac{u(r,\theta_j)-u(0,\theta_j)}{\Delta r} = \frac{\pi\Delta r^2}{4}g_0$$

也即

$$-\frac{\Delta\theta}{2}\sum_{j=0}^{M_\theta-1}(u(r,\theta_j)-u(0,\theta_j)=\frac{\pi\Delta r^2}{4}g_0$$

注意 $u_{0,j}=u_0$, $g(0,\pi)=g_0$, $M_\theta\Delta\theta=2\pi$, 知上式可化简为

$$\frac{4u_0}{\Delta r^2}-\frac{2\Delta\theta}{\pi\Delta r^2}\sum_{j=0}^{M-1}u_{1,j}=g_0 \tag{4.9.23}$$

§4.10 用离散 Fourier 变换求解椭圆型问题

本节介绍用离散 Fourier 变换来求解椭圆型方程的解, 主要思想是通过 Fourier 变换先求得傅氏域中的解, 然后再通过逆变换求出原问题的解. 本节与 §7.1.2.2 介绍的伪谱法思想实质是一致的.

考虑椭圆型边值问题

$$-\nabla^2 u=g,\quad (x,y)\in\Omega=(0,1)\times(0,1) \tag{4.10.1}$$

$$u|_{\partial\Omega}=0,\quad (x,y)\in\partial\Omega \tag{4.10.2}$$

和相应的差分格式

$$-(\frac{1}{\Delta x^2}\delta_x^2+\frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2)u_{j,k}=g_{j,k},\quad j=1,\cdots,M_x-1;\ k=1,\cdots,M_y-1 \tag{4.10.3}$$

$$u_{0,k}=u_{M_x,k}=0,\quad k=0,\cdots,M_y \tag{4.10.4}$$

$$u_{j,0}=u_{j,M_y}=0,\quad j=0,\cdots,M_x \tag{4.10.5}$$

其中 $\Delta x=\frac{1}{M_x}$ 和 $\Delta y=\frac{1}{M_y}$ 分别为 x,y 方向的步长.

设函数 $f(x)$ 定义在网格点 $G=\{x_0=0,x_1=\delta x,\cdots,x_{M_x}=1\}$ 上, 且 $f(0)=f(1)=0$. 现定义 $f_j(j=0,\cdots,M_x)$ 的离散 Fourier 变换

$$\hat{f}_j=\frac{1}{M_x}\sum_{m=0}^{M_x-1}f_m e^{-\mathrm{i}j\pi m\Delta x} \tag{4.10.6}$$

而 f_j 可表示为 $\hat{f}_j$ 的离散 Fourier 逆变换

$$f_j=\begin{cases}\displaystyle\sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x-1)/2}\hat{f}_m e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x}, & M_x\text{为奇数}\\ \displaystyle\sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x-1)/2+1}\hat{f}_m e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x}, & M_x\text{为偶数}\end{cases} \tag{4.10.7}$$

注意 $f_j(j=0,\cdots,M_x)$ 的离散 Fouier 变换与逆变换定义有多种形式, 其中常见的一种是

$$\hat{f}_j=\sum_{m=0}^{(M_x-1)/2} f_m e^{-\mathrm{i}j2\pi m\Delta x} \tag{4.10.8}$$

$$f_j=\frac{1}{M_x}\sum_{m=0}^{(M_x-1)/2} \hat{f}_m e^{\mathrm{i}m2\pi j\Delta x} \tag{4.10.9}$$

可以验证这两种定义本质上一样, 但当采用第一种正反变换对 (4.10.6)~(4.10.7) 式时, 蕴含序列 $f_j(j=0,\cdots,M_x)$ 的周期为 $2l$, 并在闭区间 $[-l,l]$ 上采用正交系 $\phi=e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{l}j\Delta x}$(这里 $l=1$). 当采用第二种正反变换对 (4.10.8) ~ (4.10.9) 式时, 蕴含序列 $f_j(j=0,\cdots,M_x)$ 的周期为 l, 并在闭区间 $[-\frac{l}{2},\frac{l}{2}]$ 采用正交系 $\phi=e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{l}j\Delta x}$ (这里 $l=1$).

为简单起见, 假定 M_x 和 M_y 均为奇数, 根据 (4.10.7) 式, 将函数 $u_{j,k}$ 和 $g_{j,k}$ 表示成有限 Fourier 级数形式

$$u_{j,k}=\sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x-1)/2} \hat{u}_{m,k}e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x} \tag{4.10.10}$$

其中

$$\hat{u}_{m,k}=\frac{1}{M_x}\sum_{m=0}^{M_x-1} u_{m,k}e^{-\mathrm{i}j\pi m\Delta x} \tag{4.10.11}$$

和

$$g_{j,k}=\sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x-1)/2} \hat{g}_{m,k}e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x} \tag{4.10.12}$$

其中

$$\hat{g}_{j,k}=\frac{1}{M_x}\sum_{m=0}^{M_x-1} g_{m,k}e^{-\mathrm{i}j\pi m\Delta x} \tag{4.10.13}$$

命题 4.10.1

$$\delta_x^2 u_{j,k}=\sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x+1)/2} -4\sin^2\frac{l\pi\Delta x}{2}\hat{u}_{m,k}e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x} \tag{4.10.14}$$

证明 注意

$$\begin{aligned}\delta_x^2 u_{jk} &= \sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x+1)/2} \hat{u}_{m,k}\delta_x^2 e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x} \\ &= \sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x+1)/2} \hat{u}_{m,k}e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x}(e^{\mathrm{i}m\pi\Delta x}-e^{-\mathrm{i}m\pi\Delta x}) \\ &= \sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x-1)/2} -4\sin^2\frac{m\pi\Delta x}{2}\hat{u}_{m,k}e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x}\end{aligned}$$

□

将 (4.10.10) 式和 (4.10.12) 式代人差分方程 (4.10.3) 中, 得到

$$(\frac{1}{\Delta x^2}\delta_x^2+\frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2)u_{j,k} = \sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x-1)/2} e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x} \tag{4.10.15}$$

$$[\frac{-4}{\Delta x^2}\sin^2\frac{m\pi\Delta x}{2}+\frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2]\hat{u}_{l,k} \tag{4.10.16}$$

$$= g_{j,k} \tag{4.10.17}$$

$$= \sum_{m=-(M_x-1)/2}^{(M_x-1)/2} e^{\mathrm{i}m\pi j\Delta x} \tag{4.10.18}$$

$$= \hat{g}_{m,k} \tag{4.10.19}$$

在上面两式乘以 $\bar{\phi}_m$ 并求和, 得

$$\begin{aligned}&[\frac{-4}{\Delta x^2}\sin^2\frac{j\pi\Delta x}{2}+\frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2]\hat{u}_{j,k}=\hat{g}_{j,k}, \\ &k=1,\cdots,M_y-1,\ l=-(M_x-1)/2,\cdots,(M_x-1)/2\end{aligned} \tag{4.10.20}$$

对边界条件 $u_{j,0}=u_{j,M_y}=0$ 作变换, 得到

$$\hat{u}_{j,0}=\hat{u}_{j,M_y},\quad j=-(M_x-1)/2,\cdots,(M_x-1)/2$$

这样变换后的问题及边界条件可以写成

$$\begin{aligned}&[-\frac{4}{\Delta x^2}\sin^2\frac{j\pi\Delta x}{2}+\frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2]\hat{u}_{j,k}=\hat{g}_{j,k}, \\ &j=1,\cdots,M_x-1,k=1,\cdots,M_y-1\end{aligned} \tag{4.10.21}$$

$$\hat{u}_{j,0}=\hat{u}_{j,M_y}=0 \tag{4.10.22}$$

可以看到, 对每个 j, 方程 (4.10.21)~(4.10.22) 可作为三对角方程组来求解. 此外, 也可对方程 (4.10.20) 对 y(以指标 k 表示) 作离散 Fourier 变换, 即

$$\hat{u}_{j,k} = \sum_{m=-(M_y-1)/2}^{(M_y-1)/2} \hat{\hat{u}}_{j,m}e^{\mathrm{i}m\pi k\Delta y} \tag{4.10.23}$$

其中

$$\hat{u}_{j,k} = \frac{1}{M_y}\sum_{m=0}^{M_y-1} \hat{u}_{j,m} e^{-\mathrm{i}m\pi k\Delta y} \tag{4.10.24}$$

$$\hat{g}_{j,k} = \sum_{m=-(M_y-1)/2}^{(M_y-1)/2} \hat{\hat{g}}_{j,m} e^{\mathrm{i}m\pi k\Delta y} \tag{4.10.25}$$

其中

$$\hat{\hat{g}}_{j,k} = \frac{1}{M_y}\sum_{m=0}^{M_y-1} \hat{g}_{j,m} e^{-\mathrm{i}m\pi k\Delta y} \tag{4.10.26}$$

于是方程 (4.10.20) 可变换成

$$\begin{aligned}&[-\frac{4}{\Delta x^2}\sin^2\frac{j\pi\Delta x}{2} - \frac{4}{\Delta y^2}\sin^2\frac{k\pi\Delta y}{2}]\hat{\hat{u}}_{j,k} = \hat{\hat{g}}_{lm}\\ &j=1,\cdots,M_x-1,\quad k=1,\cdots,M_y-1\end{aligned} \tag{4.10.27}$$

解得 $\hat{u}_{j,k}$ 为

$$\begin{aligned}&\hat{\hat{u}}_{j,k} = -\frac{1}{\frac{4}{\Delta x^2}\sin^2\frac{l\pi\Delta x}{2} + \frac{4}{\Delta y^2}\sin^2\frac{m\pi\Delta y}{2}}\hat{\hat{g}}_{j,k}\\ &j=1,\cdots,M_x-1,\quad k=1,\cdots,M_y-1\end{aligned} \tag{4.10.28}$$

首先用公式 (4.10.13) 和 (4.10.26) 式求得 $\hat{\hat{g}}_{j,k}$, 再用 (4.10.20) 式求得 $\hat{\hat{u}}_{j,k}$, 最后用 (4.10.23) 式和 (4.10.10) 式求得 $u_{j,k}$.

练 习

1. 在1/4圆形域 $\Omega = \{(x,y)|x>0, y>0, x^2+y^2<1\}$ 中求解 Laplace 混合边值问题

$$\begin{aligned}&\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0,\quad (x,y)\in\Omega\\ &u(0,y) = 0,\quad 0<y<1\\ &\frac{\partial u}{\partial y}|_{y=0} = 0,\quad 0<x<1\end{aligned}$$

其中在圆弧边界上, $u = 16x^5 - 20x^3 + 5x (0\leqslant x\leqslant 1)$. 取 $h=\frac{1}{4}$ 进行计算, 并将计算结果与问题的精确解 $u = x^5 - 10x^3y^2 + 5xy^4$ 比较.

2. 求解椭圆型第一边值问题

$$\begin{aligned}&-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0,\quad a>0\\ &u(0,y) = \sin\pi y,\quad u(1,y) = 0, 0<y<1\\ &u(x,0) = u(x,1) = 0,\quad 0<x<1\end{aligned}$$

这里 $\Omega = \{(x,y)|0 < x, y < 1\}$. 该问题的精确解为

$$u(x,y) = e^{\frac{ax}{2}} \sinh(h\sigma)(1-x)\sin\pi y/\sin(h\sigma) \tag{4.10.29}$$

其中 $\sigma = \dfrac{\sqrt{k^2+4\pi^2}}{2}$. 取 $h = \dfrac{1}{4}$, $a = 40$ 进行计算, 并与精确值作比较.

3. 在由 $y = 0$, $y = 2+2x$ 和 $y = 2-2x$ 所围的区域上求解 Laplace 方程的 Dirichlet 边值问题.

4. 在单位正方形区域上求解如下椭圆型方程的 Dirichlet 问题

$$\frac{\partial}{\partial x}(a\frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(a\frac{\partial u}{\partial y}) + f(x,y) = 0$$

其中 $f(x,y)$ 是已知函数.

5. 求解单位正方形区域上的 Poisson 方程 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f$ 的混合边值问题, 其中在 $x = 1$ 上具有 Neumann 条件 $\dfrac{\partial u}{\partial x} = g$, 在其余三边上具有 Dirichlet 条件.

6. 用一维 FFT 求解下列椭圆边值问题

$$\begin{aligned} &-\nabla^2 u = e^{x+y}, \quad (x,y) \in R = (0,1)\times(0,1) \\ &u = 0, \quad (x,y) \in \partial R \end{aligned} \tag{4.10.30}$$

7. 用二维 FFT 求解练习 1 中的问题, 比较两种方法的计算结果.

8. 在图 4.7(b) 中的正六边形网格上推导

$$-\Delta^2 u + \sigma u = f$$

的4点差分近似格式, 其中 $\sigma(x,y)$ 和 $f(x,y)$ 为已知函数.

9. 在图 4.8 的正三角形网格上, 推导方程

$$-\Delta u + \sigma u = f$$

的一个七点近似差分格式, 其中 $\sigma(x,y)$ 和 $f(x,y)$ 为已知函数.

10. 考虑柱坐标下均匀网格 ($\Delta z = \Delta r$) 上的 Lapace 方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0$$

的五点差分格式.

第五章　差分方程的求解

偏微分方程离散后形成的差分方程归结为一个线性代数方程, 可写成矩阵形式

$$Au = f \tag{5.0.1}$$

其中 A 是 $n \times n$ 阶方阵, u 是未知列向量, f 已知列向量. 通常这是一个大型的线性代数方程组, 求解该大型线性代数方程组有直接法和迭代法两种, 迭代法是一种更重要的方法. 本章介绍迭代法的基本理论与算法.

§5.1 残量校正法

§5.1.1 迭代格式

设 w 是 u 的一个近似, 则误差为 $e = u - w$, 残差为 $r = f - Aw$. 易知, e 和 r 满足方程

$$Ae = A(u - w) = f - Aw = r \tag{5.1.1}$$

由方程 (5.1.1) 得校正方程

$$u = w + e = w + A^{-1}r \tag{5.1.2}$$

因此, 对一个给定的近似解 w, 求解方程 (5.0.1) 的一种方法是计算 r, 然后由方程 (5.1.2) 计算 u. 显然, 假如能够计算 $A^{-1}r$, 则可以直接求解方程 (5.0.1) . 残量校正法是近似 A^{-1}, 然后定义迭代格式

$$w^{k+1} = w^k + Br^k \tag{5.1.3}$$

这里 $\boldsymbol{r}^k=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{w}^k$, B 是 A^{-1} 的某种近似. 若 $B=I$, 则得 Richardson 迭代格式

$$\boldsymbol{w}^{k+1}=\boldsymbol{w}^k+\boldsymbol{r}^k \tag{5.1.4}$$

§5.1.2 收敛性分析

选择初始值 $\boldsymbol{w}^0$, 由迭代格式 (5.1.3) 得到序列 $\boldsymbol{w}^k$, 显然, 序列 $\boldsymbol{w}^k$ 对所有的 B 和 $\boldsymbol{w}^0$ 都应收敛到方程 (5.0.1) 的解. 下面分析收敛性. 由方程 (5.1.1), 可将残量校正格式 (5.1.3) 改写成

$$\boldsymbol{w}^{k+1}=\boldsymbol{w}^k+B\boldsymbol{r}^k=\boldsymbol{w}^k+BA\boldsymbol{e}^k \tag{5.1.5}$$

这里 $\boldsymbol{e}^k=\boldsymbol{u}-\boldsymbol{w}^k$, 若将方程 (5.1.5) 乘以 -1 再加 $\boldsymbol{u}$, 则有

$$\boldsymbol{e}^{k+1}=\boldsymbol{e}^k-BA\boldsymbol{e}^k=(I-BA)\boldsymbol{e}^k\triangleq R\boldsymbol{e}^k \tag{5.1.6}$$

其中矩阵 $R=I-BA$ 称为**误差传播矩阵** 或**迭代矩阵**. 因为

$$||\boldsymbol{e}^{k+1}||\leqslant||I-BA||\,||\boldsymbol{e}^k||\leqslant\cdots\leqslant||I-BA||^{k+1}||\boldsymbol{e}^0||=||R||^{k+1}||\boldsymbol{e}^0||$$

我们称 $||R||=||I-BA||$ 为**收敛因子**, 显然有下面的结果.

命题 5.1.1 若 $||R||<1$, 则近似方程 (5.0.1) 的解序列 $\boldsymbol{w}^k$ 对任意初始猜测 $\boldsymbol{w}^0$ 将以模 $||\cdot||$ 收敛到方程 (5.0.1) 的解 $\boldsymbol{u}$.

命题 5.1.1 中的模 $||\cdot||$ 指有限维 (n) 空间的上确界模或 l_2 模. 矩阵的上确界范数虽然容易计算, 但不常用于证明迭代的收敛性. 假如考虑 l_2 模及矩阵 R 是对称的, 则 $||R||_2=\rho(R)$, 其中 $\rho(R)$ 为 R 的谱半径, 所以可以计算 R 的特征值来确定收敛因子.

定理 5.1.1 残量校正方程 $\boldsymbol{e}^{k+1}=R\boldsymbol{e}^k$ 对任意的初始选择 $\boldsymbol{w}^0$ 当且仅当 $\rho(R)<1$ 时收敛.

证明 对任意初始向量 $\boldsymbol{w}^0$, 则第 k 次残量校正后的误差满足

$$\boldsymbol{e}^{k+1}=R^k\boldsymbol{e}^0$$

由于 $\lim\limits_{k\to\infty}\mathrm{e}^{k+1}=0$, 故上式等价于 $\lim\limits_{k\to\infty}R^k=0$, 又由定理 1.4.8 知, 这等价于 $\rho(R)<1$. 因此对任意初始向量 w^0, 迭代收敛的充要条件是 $\rho(R)<1$.

□

假设 $n\times n$ 阶矩阵 R 有 n 个完全无关的特征向量, 特征值按大到小排列成 $|\lambda_1|\geqslant|\lambda_2|\geqslant\cdots\geqslant|\lambda_n|$, 对应的特征向量记为 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$, 则可以依据 A 的特征向量写出初始误差向量 $\boldsymbol{e}^0$ 为

$$\boldsymbol{e}^0=\sum_{i=1}^{n}a_i\boldsymbol{x}_i \tag{5.1.7}$$

又

$$e^{k+1} = Re^k = R^{k+1}e^0 = \sum_{i=1}^{n} a_i R^{n+1} x_i = \sum_{i=1}^{n} a_i \lambda_i^{k+1} x_i \tag{5.1.8}$$

上式可改写成

$$e^{k+1} = \lambda_1^{k+1}[a_1 x_1 + \sum_{j=2}^{n} a_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k+1} x_i] \tag{5.1.9}$$

因为当 $k \to \infty$ 时,$|\lambda_j/\lambda_1|^{k+1} \to 0$, 显然, 最终收敛性由 $|\lambda_1^{k+1}|$ 确定. 注意, 当 k 很大时, 有

$$e^{k+1} \approx a_1 \lambda_1^{k+1} x_1 \quad 及 \quad \|e^{k+m}\|/\|e^k\| \approx |\lambda_1|^m$$

因此为将误差减少一个倍数

$$\zeta = \frac{\|e^{k+m}\|}{\|e^k\|}$$

必须迭代约 $m = \ln\zeta \ln|\lambda_1|$ 次. 例如将误差减小到 10^{-q} 倍, 则 $m = -\frac{1}{\ln|\lambda_1|}$. 当 $|\lambda_1| \approx 1$ 时,m 变得很大, 例如, 为将误差减少到 10^{-1} 倍, 若 $|\lambda_1| = 0.99$, 则迭代次数必须为 $m \approx 230$.

上面的分析表明残量校正格式的收敛性主要由其中一个最大特征值 (和其他 $|\frac{\lambda_j}{\lambda_1}| \approx 1$ 的特征值) 控制. 在残量校正计算中大部分工作是消除与那些 "最大特征值" 相关的特征向量的分量.

定义 5.1.1 设 $A, B \in C^{n\times n}$, 如对某正整数 k, $\|R^k\| < 1$, 则称

$$R(A^k) = -\ln(\|A^k\|)^{\frac{1}{k}} = -\frac{1}{k}\ln\|A^k\|$$

为矩阵 A 的第 k 次迭代的平均收敛速度. 若 $R(A^k) < R(B^k)$, 则称矩阵 B 比 A 的第 k 次迭代快.

定理 5.1.2 设 $A \in C^{n\times n}$, 则 k 次迭代的平均收敛速度满足

$$\lim_{k\to\infty} R(A^k) = -\ln\rho(A) \triangleq R_\infty(A) \tag{5.1.10}$$

因此称 $R_\infty(A)$ 为矩阵 A 的**渐近收敛速度**.

证明 由定理 1.4.2 知, $\rho(A) \leqslant \|A\|$, 所以

$$\rho(A) = [\rho(A)^k]^{\frac{1}{k}} = [\rho(A^k)]^{\frac{1}{k}} \leqslant \|A^k\|^{\frac{1}{k}} \tag{5.1.11}$$

又对任给的 $\varepsilon > 0$, 作矩阵

$$A_\varepsilon = \frac{A}{\rho(A) + \varepsilon}$$

则显然 $\rho(A_\varepsilon) < 1$. 于是由定理 1.4.8 知, $\lim\limits_{k\to\infty} A_\varepsilon^k = 0$, 因此存在正整数 $N = N(\varepsilon)$, 使得当 $k > N$ 时,

$$||A_\varepsilon^k|| = \frac{||A^k||}{(\rho(A)+\varepsilon)^k} < 1, \quad \forall k > N(\varepsilon)$$

上式等价于

$$||A^k||^{\frac{1}{k}} \leqslant \rho(A) + \varepsilon \tag{5.1.12}$$

结合 (5.1.11) 式, 有

$$\rho(A) \leqslant ||A^k||^{\frac{1}{k}} \leqslant \rho(A) + \varepsilon$$

由于 $\varepsilon > 0$ 任意, 不妨取 $\varepsilon = \dfrac{1}{k}$, 因此当 $k \to \infty$ 时, 有

$$\rho(A) = \lim_{k\to\infty} ||A^k||^{\frac{1}{k}}$$

从而

$$\begin{aligned}\ln\rho(A) = \ln\lim_{k\to\infty}||A^k||^{\frac{1}{k}} &= \lim_{k\to\infty}\frac{1}{k}\ln||A^k|| \\ &= -\lim_{k\to\infty} R(A^k)\end{aligned}$$

即

$$\lim_{k\to\infty} R(A^k) = -\ln\rho(A)$$

□

又由于 $||A^k|| \geqslant \rho(A^k) = [\rho(A)]^k \ (k \geqslant 1)$, 因此有下列命题.

推论 5.1.1 设 $A \in C^{n\times n}$, $||A^k|| < 1 \ (k \geqslant 1)$, 则 $R_\infty(A) \geqslant R(A^k)$.

例1 已知

$$A = \begin{bmatrix} \alpha & 4 \\ 0 & \alpha \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}, \quad 0 < \alpha < \beta < 1$$

试比较 k 次迭代矩阵 A^k 和 B^k 的平均收敛速度.

解 由于

$$A^k = \begin{bmatrix} \alpha^k & 4k\alpha^{k-1} \\ 0 & \alpha^k \end{bmatrix}, \quad B^k = \begin{bmatrix} \alpha^k & 0 \\ 0 & \beta^k \end{bmatrix}$$

于是

$$||A^k|| = \left\{\alpha^{2k} + 8k^2\alpha^{2k-2}[1 + (1 + \frac{\alpha^2}{4k^2})]^{\frac{1}{2}}\right\}^{\frac{1}{2}}, \qquad ||B^k|| = \beta^k \tag{5.1.13}$$

对充分接近于 1 的 α, 由 (5.1.13) 式知, $||A^k|| \ (k \geqslant 1)$ 是递增的, 且对某些小的 k 值, $||A^k|| > ||B^k||$, 但当 $k \to \infty$ 时, 显然有 $||A^k|| < ||B^k||$.

□

§5.1.3 迭代中止准则

有两种最常用和最成功的迭代中止准则, 一种是度量相邻两次迭代解的误差

$$||\boldsymbol{w}^{k+1}-\boldsymbol{w}^k|| \tag{5.1.14}$$

另一种是度量残量

$$||\boldsymbol{r}^k||=||\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{w}^k|| \tag{5.1.15}$$

下面分析这两种中止准则的合理性. 对第二种中止准则, 注意

$$\boldsymbol{e}^k=\boldsymbol{u}-\boldsymbol{w}^k=A^{-1}(A\boldsymbol{u}-A\boldsymbol{w}^k)=A^{-1}(\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{w}^k)=A^{-1}\boldsymbol{r}^k \tag{5.1.16}$$

所以

$$||\boldsymbol{e}^k||\leqslant||A^{-1}||\ ||\boldsymbol{r}^k|| \tag{5.1.17}$$

因此若使残量 $\boldsymbol{r}^k$ 的模有界, 解与真解的误差模 $||\boldsymbol{e}^k||$ 也将有界, 所以, 使用 $||\boldsymbol{r}^k||$ 作为中止准则是合理的.

从残量校正法的定义

$$\boldsymbol{w}^{k+1}-\boldsymbol{w}^k=B\boldsymbol{r}^k$$

其中 B 是 A^{-1} 的某种近似. 由该式再结合 (5.1.16) 式, 有

$$\boldsymbol{e}^k=A^{-1}\boldsymbol{r}^k=A^{-1}B^{-1}(\boldsymbol{w}^{k+1}-\boldsymbol{w}^k)$$

所以

$$||\boldsymbol{e}^k||\leqslant||A^{-1}B^{-1}||\ ||\boldsymbol{w}^{k+1}-\boldsymbol{w}^k|| \tag{5.1.18}$$

因此, 假若使连续两次迭代的误差有界, 则解与真解的误差模 $||\boldsymbol{e}^k||$ 也有解.

由于 (5.1.17) 式和 (5.1.18) 式中均有 A^{-1}, 经常会出现难以计算的情况. 下面以迭代矩阵来表示误差估计.

定理 5.1.3 设 R 是残量校正法的迭代矩阵且 $||R||<1$, $\boldsymbol{w}^k$ 是第 k 次迭代解, 则有后验估计

$$||\boldsymbol{e}^k||\leqslant\frac{||R||}{1-||R||}||\boldsymbol{w}^k-\boldsymbol{w}^{k-1}|| \tag{5.1.19}$$

和先验估计

$$||\boldsymbol{e}^k||\leqslant\frac{||R||^k}{1-||R||}||\boldsymbol{w}^{(1)}-\boldsymbol{w}^{(0)}|| \tag{5.1.20}$$

其中 $\boldsymbol{e}^k=\boldsymbol{u}-\boldsymbol{w}^k$, $\boldsymbol{u}$ 为真解.

证明 由残量校正方程 $\boldsymbol{e}^k = R\boldsymbol{e}^{k-1}$ 知

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}^k &= R\boldsymbol{e}^{k-1} = R(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{w}^k + \boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1}) \\ &= R(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{w}^k) + R(\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1}) = R\boldsymbol{e}^k + R(\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1})\end{aligned}$$

即

$$(I - R)\boldsymbol{e}^k = R(\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1})$$

或

$$\boldsymbol{e}^k = (I - R)^{-1}R(\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1})$$

注意 $||R|| < 1$, 有

$$||\boldsymbol{e}^k|| = ||(I - R)^{-1}||\ ||R||\ ||\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1}|| \leqslant \frac{||R||}{1 - ||R||}||\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1}|| \tag{5.1.21}$$

此即误差的后验估计 (5.1.19) 式.

因为

$$\boldsymbol{e}^k = R\boldsymbol{e}^{k-1}, \qquad \boldsymbol{e}^{k-1} = R\boldsymbol{e}^{k-2}$$

两式相减得

$$\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1} = R(\boldsymbol{w}^{k-1} - \boldsymbol{w}^{k-2})$$

从而

$$||\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1}|| \leqslant ||R||\ ||\boldsymbol{w}^{k-1} - \boldsymbol{w}^{k-2}|| \leqslant \cdots \leqslant ||R||^{k-1}||\boldsymbol{w}^1 - \boldsymbol{w}^0||$$

将该式代入 (5.1.21) 式中有

$$||\boldsymbol{e}^k|| \leqslant \frac{||R||^k}{1 - ||R||}||\boldsymbol{w}^1 - \boldsymbol{w}^0||$$

此即误差的先验估计式.

□

注意当 $||R|| \approx 1$ 时, 即使相邻两次的迭代解 $||\boldsymbol{w}^k - \boldsymbol{w}^{k-1}||$ 很小, 也不能判定 $||\boldsymbol{e}^k||$ 很小.

§5.2 基本迭代法

首先将方程 $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$ 中的矩阵 A 分解成

$$A = L + D + U$$

其中 L 是下三角矩阵, 由 A 的对角线之下的元素组成, D 是对角矩阵, 由 A 的对角线元素组成, U 是上三角矩阵, 由 A 的对角线之上的元素组成, 即

$$A = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & & a_{1n} \\ & 0 & \cdots & & a_{2n} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & 0 & a_{n-1,n} \\ & & & & 0 \end{bmatrix} \tag{5.2.1}$$

下面将看到, 选择 L, D, U 的不同组合, 将得到不同的迭代格式.

§5.2.1 Jacobi 迭代格式

Jacobi 迭代是先假设初始值 $\boldsymbol{w}^0$, 然后计算新值 $\boldsymbol{w}^1$, 并继续这一过程, 直至收敛. 用矩阵的形式可表示为

$$D\boldsymbol{w}^{k+1} + (L+U)\boldsymbol{w}^k = \boldsymbol{f} \tag{5.2.2}$$

即

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = -D^{-1}(L+U)\boldsymbol{w}^k + D^{-1}\boldsymbol{f} \tag{5.2.3}$$

因 $\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{f} - A\boldsymbol{w}^k$, 也即

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{r}^k + (L+D+U)\boldsymbol{w}^k \tag{5.2.4}$$

所以 (5.2.3) 式可写成

$$\begin{aligned} \boldsymbol{w}^{k+1} &= -D^{-1}(L+U)\boldsymbol{w}^k + D^{-1}(\boldsymbol{r}^k + A\boldsymbol{w}^k) \\ &= \boldsymbol{w}^k + D^{-1}\boldsymbol{r}^k \end{aligned} \tag{5.2.5}$$

Jacobi 迭代格式的迭代矩阵为

$$R_J = I - D^{-1}A = D^{-1}(D-A) = -D^{-1}(L+U) \tag{5.2.6}$$

Jacobi 迭代格式的分量形式为

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}}(f_i - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij}x_j^k), \quad i = 1, \cdots, n \tag{5.2.7}$$

Jacobi 迭代格式的一个变化是**加权 Jacobi 迭代**. 该格式先用 Jacobi 格式算出一个中间值 $\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1}$, 然后通过一个正参数 ω 来加速修正中间值 $\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1}$, 得到新的迭代值 $\boldsymbol{w}^{k+1}$. 可以表示为

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1} &= \boldsymbol{w}^k + D^{-1}\boldsymbol{r}^k \\ \boldsymbol{w}^{k+1} &= \boldsymbol{w}^k + \omega(\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1} - \boldsymbol{w}^k)\end{aligned} \tag{5.2.8}$$

即

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = \boldsymbol{w}^k + \omega D^{-1}\boldsymbol{r}^k \tag{5.2.9}$$

所以加权 Jacobi 迭代格式的迭代矩阵为

$$R_{WJ} = I - \omega D^{-1}A = (1-\omega)I + \omega R_J \tag{5.2.10}$$

其中 R_J 为 Jacobi 迭代格式的迭代矩阵.

例 1 求 Laplace 方程第一边值问题

$$\begin{aligned}&-\Delta u = -\left(\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y}\right) = 0, \quad (x,y) \in \Omega = (0,1)\times(0,1) \\ &u = g, \quad (x,y) \in \partial\Omega\end{aligned}$$

的五点差分格式

$$\frac{1}{\Delta x^2}\delta_x^2 u_{i,j} + \frac{1}{\Delta y^2}\delta_y^2 u_{i,j} = 0, \quad i = 1,\cdots,M_x - 1;\ j = 1,\cdots,M_y - 1$$

的 Jacobi 迭代矩阵的特征值, 从而判断迭代格式的收敛性. 其中 Δx 和 Δy 分别为 x 和 y 的网格步长.

解 设 λ 为 Jacobi 迭代矩阵的特征值, $\boldsymbol{x}$ 为其特征向量, 则满足

$$R_J\boldsymbol{x} = -D^{-1}(L+U)\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x} \tag{5.2.11}$$

所以

$$-(L+U)\boldsymbol{x} = \lambda D\boldsymbol{x}$$

或

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\Delta x^2}(x_{i+1,j} + x_{i-1,j}) + \frac{1}{\Delta y^2}(x_{i,j+1} + x_{i,j-1}) = h\lambda x_{i,j} \\ &\qquad i = 1,\cdots,M_x - 1;\ j = 1,\cdots,M_y - 1\end{aligned} \tag{5.2.12}$$

这里 $h = 2\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right)$, 并假定 $x_{0,j} = x_{M_x,j} = 0$ $(j = 1,\cdots,M_y)$, $x_{i,0} = x_{i,M_y} = 0$ $(i = 1,\cdots,M_x)$.

下面用分离变量法来求矩阵 R_J 的特征值. 设 $x_{i,j} = x_i y_j$, 将其代人 (5.2.12) 得

$$\frac{1}{\Delta x^2}(x_{i+1}y_j + x_{i-1}y_j) + \frac{1}{\Delta y^2}(x_i y_{j+1} + x_i y_{j-1}) = h\lambda x_i y_j$$

两端除以 $x_i y_j$ 整理得

$$h\lambda - \frac{x_{i+1}+x_{i-1}}{x_i\Delta x^2} = \frac{y_{j+1}+y_{j-1}}{y_j\Delta y^2} \tag{5.2.13}$$

左边是 i 的函数, 右边是 j 的函数, 两边相等, 只能是常数, 例如 μ. 因此, 包括边界条件, 我们得到下面的差分方程

$$\begin{aligned} &y_{j+1}+y_{j-1} = \mu\Delta y^2 y_j, \quad j=1,\cdots,M_y-1 \\ &y_0 = y_{M_y} = 0 \end{aligned} \tag{5.2.14}$$

$$\begin{aligned} &x_{i+1}+x_{i-1} = (h\lambda-\mu)\Delta x^2 x_i, \quad i=1,\cdots,M_x-1 \\ &x_0 = x_{M_x} = 0 \end{aligned} \tag{5.2.15}$$

方程 (5.2.14) 等价于特征值问题

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{Y} = \mu\Delta y^2 \boldsymbol{Y}$$

其中 $Y=(y_1,y_2,\cdots,y_{M_y-1})^T$. 该方程的系数矩阵的特征值 γ_s 为

$$\gamma_s = \mu_s\Delta y^2 = \cos\frac{s\pi}{M_y}, \quad s=1,\cdots,M_y-1 \tag{5.2.16}$$

而方程 (5.2.15) 等价于特征值问题

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{X} = (h\lambda-\mu_s)\boldsymbol{X}, \quad s=1,\cdots,M_y-1$$

其中 $\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\cdots,x_{M_x-1})^T$. 该方程的系数矩阵的特征值 ω_s^p 是

$$\omega_s^p = (h\lambda_s^p-\mu_s)\Delta x^2 2\cos\frac{p\pi}{M_x}, \quad p=1,\cdots,M_x-1; s=1,\cdots,M_y-1 \tag{5.2.17}$$

联立 (5.2.16) 式和 (5.2.17) 式消去 μ_s, 得 Jacobi 迭代矩阵的特征值 λ_s^p 为

$$\begin{aligned} &\lambda_s^p = \frac{2}{h}\left(\frac{1}{\Delta x^2}\cos\frac{p\pi}{M_x}+\frac{1}{\Delta y^2}\cos\frac{s\pi}{M_y}\right) \\ &s=1,\cdots,M_y-1;\ p=1,\cdots,M_x-1 \end{aligned} \tag{5.2.18}$$

显然 $|\lambda_s^p|$ 的最大值出现在 $s=p=1$(及 $s=M_y-1$ 和 $p=M_x-1$) 处, 所以

$$\rho(R_J)=\frac{2}{h}(\frac{1}{\Delta x^2}\cos\frac{\pi}{M_x}+\frac{1}{\Delta y^2}\cos\frac{\pi}{M_y})$$

因为

$$\rho(R_J)<\frac{2}{2(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2})}(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2})\leqslant 1$$

所以 Jacobi 松弛格式求解该 Laplace 第一边值问题是收敛的.

□

§5.2.2 Gauss-Seidel 迭代格式

Gauss-Seidel 迭代简称 G-S 迭代, 总是利用最新算出的值, 迭代格式为可表示为

$$(L+D)\boldsymbol{w}^{k+1}+U\boldsymbol{w}^k=\boldsymbol{f} \tag{5.2.19}$$

即

$$\boldsymbol{w}^{k+1}=-(L+D)^{-1}U\boldsymbol{w}^k+(L+D)^{-1}\boldsymbol{f} \tag{5.2.20}$$

由 (5.2.4) 式可将上式改写成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{w}^{k+1}&=-(L+D)^{-1}U\boldsymbol{w}^k+(L+D)^{-1}[\boldsymbol{r}^k+(L+D+U)\boldsymbol{w}^k]\\&=\boldsymbol{w}^k+(L+D)^{-1}\boldsymbol{r}^k\end{aligned} \tag{5.2.21}$$

迭代矩阵为

$$R_{GS}=-(L+D)^{-1}U \tag{5.2.22}$$

G-S 迭代的分量形式可写成

$$x_i^{k+1}=\frac{1}{a_{ii}}(f_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{k+1}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^k),\quad i=1,2,\cdots,n \tag{5.2.23}$$

关于 Jacobi 迭代和 G-S 迭代的收敛性有如下命题.

定理 5.2.1 若 A 严格对角占优, 则 Jacobi 迭代和 G-S 迭代对任意的初始值 $\boldsymbol{w}^0$ 都收敛.

证明 Jacobi 迭代 只要证明 R_J 的某种范数小于 1 即可. 由于 A 严格对角占优 ($a_{ii}\neq 0$), 所以

$$\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|<|a_{ii}|,\quad i=1,2,\cdots,n$$

即

$$\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}|<1$$

又

$$\|R_J\|_\infty = \| - D^{-1}(L+U)\|_\infty = \max_i\left(\sum_{j=1,j\neq i}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|\right)$$

故 $\|R_J\|_\infty < 1$, 从而 Jacobi 迭代收敛.

G-S 迭代 设 λ 是 $R_{GS} = -(L+D)^{-1}U$ 的任一特征值, $\boldsymbol{x} \neq 0$ 是相应的特征向量, 则有

$$(\lambda(L+D)+U)\boldsymbol{x} = 0 \tag{5.2.24}$$

现证必有 $|\lambda| < 1$. 用反证法. 若 $|\lambda| \geqslant 1$, 又因为 A 为严格对角占优矩阵, 所以

$$\begin{aligned}|\lambda| &> |\lambda|\sum_{j=1}^{i-1}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| + |\lambda|\sum_{j=i+1}^{n}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| \\ &\geqslant |\lambda|\sum_{j=1}^{i-1}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| + \sum_{j=i+1}^{n}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|\end{aligned}$$

即

$$|\lambda| > |\lambda|\sum_{j=1}^{i-1}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| + \sum_{j=i+1}^{n}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|$$

这表明矩阵 $\lambda(L+D)+U = \lambda L+\lambda D+U$ 也严格对角占优, 由定理 1.3.4 知 $\lambda(L+D)+U$ 非奇异, 因此 (5.2.24) 只能有零解 $\boldsymbol{x} = 0$. 矛盾. 所以 $|\lambda| < 1$. 从而 G-S 迭代收敛.

□

定理 5.2.2 *若 A 不可约对角占优, 则 Jacobi 迭代和 G-S 迭代对任意的初值 $\boldsymbol{w}^0$ 都收敛.*

证明 我们只需要证明 $\rho(R_J) < 1$ 和 $\rho(R_{GS}) < 1$. 对 Jacobi 迭代, 设 λ 是 $R_J = -D^{-1}(L+U)$ 的特征值, $\boldsymbol{x} \neq 0$ 是相应的特征向量, 则有

$$(\lambda D + L + U)\boldsymbol{x} = 0 \tag{5.2.25}$$

假设 $|\lambda| \geqslant 1$, 则由 A 的不可约对角占优性, 知 $\lambda D + L + U$ 也一定不可约对角占优, 从而由定理 1.3.8 知, $\lambda D + L + U$ 非奇异, 因此方程 (5.2.25) 只有零解 $\boldsymbol{x} = 0$. 矛盾. 所以 $\rho(R_J) < 1$, 从而 Jacobi 迭代收敛.

对 G-S 迭代, 仍用反正法. 设 $R_{GS} = -(L+D)^{-1}U$ 有一个特征值 λ 满足 $|\lambda| \geqslant 1$, 则 $\det(R_{GS} - \lambda I) = 0$, 即

$$\begin{aligned}\det(-(L+D)^{-1}U - \lambda I) &= \det((L+D)^{-1})(U + (L+D)\lambda I)) \\ &= \det((L+D)^{-1})\det(U + (L+D)\lambda I) \\ &= \lambda^{-1}\det((L+D)^{-1})\det(L + D + \lambda^{-1}U) = 0\end{aligned} \tag{5.2.26}$$

因 A 不可约对角占优, 所以 $a_{ii} \neq 0(i=1,\cdots,n)$, 于是 $\det(L+D)^{-1} \neq 0$. 又 $A = L+D+U$ 与 $L+D+\lambda^{-1}U$ 的零元素与非零元素位置完全一样, 所以 $L+D+\lambda^{-1}U$ 不可约, 再注意 $|\lambda| \geqslant 1$, 所以 $L+D+\lambda^{-1}U$ 也必对角占优. 因此, 由定理 1.3.8 知,$L+D+\lambda^{-1}U$ 非奇异, 即 $\det(L+D+\lambda^{-1}U) \neq 0$. 从而 (5.2.26) 式不等于零. 矛盾. 因此必有 $\rho(R_{GS}) < 1$, 从而 G-S 迭代收敛.

□

定理 5.2.3 若 A 对称正定, 则 $\rho(R_{GS}) < 1$, 从而 G-S 迭代收敛.

该定理是下面判断逐次超松弛迭代格式收敛性定理 5.2.6 当 $\omega = 1$ 时的特殊情况.

例 2 考虑例 1 中的 G-S 迭代矩阵的特征值.

解 设 λ 为 G-S 迭代矩阵的特征值, $\boldsymbol{x} \neq 0$ 为其特征向量, 则满足

$$R_{GS}\boldsymbol{x} = -(L+D)^{-1}U\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$$

或

$$-U\boldsymbol{x} = \lambda(L+D)\boldsymbol{x}$$

也即

$$\frac{1}{\Delta x^2}x_{i+1,j} + \frac{1}{\Delta y^2}x_{i,j+1} = \lambda\left[-\frac{1}{\Delta x^2}x_{i-1,j} + 2\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)x_{i,j} - \frac{1}{\Delta y^2}x_{i,j-1}\right] \tag{5.2.27}$$

其中假定 $u_{0,j} = u_{M_x,j} = 0\ (j=0,\cdots,M_y)$, $u_{i,0} = u_{i,M_y} = 0\ (i=0,\cdots,M_x)$.

现仍用分离变量法求解 (5.2.27) 式. 设 $x_{i,j} = x_i y_j$, 代入 (5.2.27) 式中, 得

$$\frac{1}{\Delta x^2}x_{i+1}y_j + \frac{1}{\Delta y^2}x_i y_{j+1} = \lambda\left[-\frac{1}{\Delta x^2}x_{i-1}y_j + 2\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)x_i y_j - \frac{1}{\Delta y^2}x_i y_{j-1}\right]$$

上式两端同除 $x_i y_j$, 整理得

$$\frac{1}{\Delta x^2}\frac{x_{i+1}}{x_i} + \frac{\lambda}{\Delta x^2}\frac{x_{i-1}}{x_i} = h\lambda - \left(\frac{1}{\Delta y^2}\frac{y_{j+1}}{y_j} + \frac{\lambda}{\Delta y^2}\frac{y_{j-1}}{y_j}\right) \tag{5.2.28}$$

其中 $h = 2\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)$. 同理, 方程 (5.2.28) 两端只能取常数, 设为 μ. 因此, 包括边界条件, 得到两组差分方程

$$\begin{aligned} &\lambda y_{j-1} + y_{j+1} = (h\lambda - \mu)\Delta y^2 y_j, \quad j=1,\cdots,M_y-1 \\ &y_0 = y_{M_y} = 0 \end{aligned} \tag{5.2.29}$$

$$\begin{aligned} &\lambda x_{i-1} + x_{i+1} = \mu\Delta x^2 x_j, \quad i=1,\cdots,M_x-1 \\ &x_0 = x_{M_x} = 0 \end{aligned} \tag{5.2.30}$$

方程 (5.2.29) 等价于特征值问题

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ \lambda & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda & 0 & 1 \\ & & & \lambda & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{Y} = (h\lambda - \mu)\Delta y^2 \boldsymbol{Y}$$

其中 $Y = (y_1, y_2, \cdots, y_{M_y-1})^T$. 该方程的系数矩阵 ($M_y - 1$ 阶三对角阵) 的特征值 γ_s 为

$$\gamma_s = (h\lambda - \mu_s)\Delta y^2 = 2\sqrt{\lambda}\cos\frac{s\pi}{M_y}, \quad s = 1, \cdots, M_y - 1 \tag{5.2.31}$$

方程 (5.2.30) 等价于特征值问题

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ \lambda & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda & 0 & 1 \\ & & & \lambda & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{X} = \mu_s \Delta x^2 \boldsymbol{X}, s = 1, \cdots, M_y - 1$$

其中 $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_{M_x-1})^T$. 该方程系数矩阵 ($M_x - 1$ 阶三对角阵) 的特征值 ω_s^p 为

$$\omega_s^p = \mu_s \Delta x^2 = 2\sqrt{\lambda_s^p}\cos\frac{p\pi}{M_x}, \quad p = 1, \cdots, M_x - 1; \ s = 1, \cdots, M_y - 1 \tag{5.2.32}$$

由 (5.2.31) 式和 (5.2.32) 式联立消去 μ_s, 可得 G-S 迭代矩阵的特征值为

$$\lambda_s^p = \frac{4}{h^2}\left(\frac{1}{\Delta x^2}\cos\frac{p\pi}{M_x} + \frac{1}{\Delta y^2}\cos\frac{s\pi}{M_y}\right)^2 \\ s = 1, \cdots, M_y - 1; \ p = 1, \cdots, M_x - 1 \tag{5.2.33}$$

最大特征值为

$$\lambda_1^1 = \frac{4}{h^2}\left(\frac{1}{\Delta x^2}\cos\frac{\pi}{M_x} + \frac{1}{\Delta y^2}\cos\frac{\pi}{M_y}\right)^2 \tag{5.2.34}$$

所以

$$|\lambda_1^1| < 1$$

因此由定理 5.1.1 知用 G-S 迭代格式求解收敛. 我们还看到 G-S 迭代矩阵的特征值是 Jacobi 迭代矩阵特征值的平方, 因此 G-S 迭代要比 Jacobi 迭代快.

□

§5.2.3 逐次超松弛迭代格式

逐次超松弛 (SOR) 方法是一种通过一个正参数 ω 来加速 G-S 迭代法的一种方法. 给定 $\boldsymbol{w}^k$, 用 G-S 迭代计算一个临时值 $\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1}$, 然后按下式

$$\boldsymbol{w}^{k+1}=\boldsymbol{w}^k+\omega(\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1}-\boldsymbol{w}^k) \tag{5.2.35}$$

来计算新值 $\boldsymbol{w}^{k+1}$, 再由 $\boldsymbol{w}^{k+1}$ 出发, 重复这一过程, 直至收敛. SOR 迭代过程可以表示为

$$D\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1}+L\boldsymbol{w}^{k+1}+U\boldsymbol{w}^k=\boldsymbol{f} \tag{5.2.36}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{w}^{k+1}&=\boldsymbol{w}^k+\omega(\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1}-\boldsymbol{w}^k)\\&=\omega\bar{\boldsymbol{w}}^{k+1}+(1-\omega)\boldsymbol{w}^k\end{aligned} \tag{5.2.37}$$

由上两式消去 $\bar{\mathrm{w}}^{k+1}$, 得

$$\boldsymbol{w}^{k+1}=(D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]\boldsymbol{w}^k+\omega(D+\omega L)^{-1}\boldsymbol{f} \tag{5.2.38}$$

或由 (5.2.4) 式可将上式改写成

$$\boldsymbol{w}^{k+1}=\boldsymbol{w}^k+\omega(D+\omega L)^{-1}\boldsymbol{r}^k \tag{5.2.39}$$

其中 $\det(D+\omega L)\neq 0$, 因为 $D+\omega L$ 为主对角元素 $a_{ii}\neq 0$ 的下三角阵. 相应的迭代矩阵为

$$R_{SOR}=(D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]$$

当 $\omega=1$ 时, $R_{SOR}=R_{GS}$, 即 SOR 迭代退化为 G-S 迭代. SOR 迭代的分量形式为 (仍假定 $a_{ii}\neq 0(i=1,\cdots,n)$)

$$x_i^{k+1}=(1-\omega)x_i^k+\frac{\omega}{a_{ii}}(f_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{k-1}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^k),\quad i=1,\cdots,n \tag{5.2.40}$$

关于收敛性, 有下面的定理.

定理 5.2.4 (Kahan) SOR 迭代矩阵满足

$$\rho(R_{SOR})\geqslant|\omega-1| \tag{5.2.41}$$

从而 SOR 迭代收敛的一个必要条件是

$$0<\omega<2 \tag{5.2.42}$$

证明　若 $\lambda_i(i=1,\cdots,n)$ 是 R_{SOR} 的特征值, 则

$$\begin{aligned}\prod_{i=1}^{n}|\lambda_i| = \det(R_{SOR}) &= \det((D+\omega L)^{-1})\det((1-\omega)D-\omega U)\\ &= \det(D^{-1})\det((1-\omega)D) = (\det D)^{-1}(1-\omega^{-1})^n\det(D)\\ &\leqslant \prod_{i=1}^{n}\rho(R_{SOR}) = [\rho(R_{SOR}]^n = (1-\omega)^n\end{aligned}$$

若 SOR 迭代收敛, 则 $\rho(R_{SOR})<1$, 因此由上式得 $0<\omega<2$.

□

可以证明若系数矩阵 A 是不可约的和对角占优的, 则 SOR 方法对所有 $0<\omega\leqslant 1$ 收敛 (Yong, 1971). 后面的定理将证明, 当 A 对称正定时, $0<\omega<2$ 是 G-S 迭代收敛的充分条件.

§5.2.4 对称与反对称超松弛迭代格式

SOR 迭代格式的两个变形是对称超松弛迭代格式 (SSOR) 和反对称超松弛迭代格式 (USSOR).

SSOR 是连续两次使用 SOR 迭代, 第一次是“向前”的 SOR, 即采用具有松弛因子 ω 的 SOR, 第二次是“向后”的 SOR, 松弛因子仍为 ω, 这两个过程可以表示为

$$\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} = R_{SOR}\boldsymbol{w}^k + B_1\boldsymbol{f} \tag{5.2.43}$$

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = \bar{R}_{SOR}\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} + B_2\boldsymbol{f}s \tag{5.2.44}$$

其中

$$R_{SOR} = (D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D-\omega U] \tag{5.2.45}$$

$$B_1 = \omega(D+\omega L)^{-1} \tag{5.2.46}$$

$$\bar{R}_{SOR} = (D+\omega U)^{-1}[(1-\omega)D-\omega L] \tag{5.2.47}$$

$$B_2 = \omega(D+\omega U)^{-1} \tag{5.2.48}$$

(5.2.43) 式和 (5.2.44) 也可表示为

$$\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{w}^k + B_1\boldsymbol{r}^k \tag{5.2.49}$$

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = \boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} + B_2\boldsymbol{r}^{k+\frac{1}{2}} \tag{5.2.50}$$

其中

$$\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{f} - A\boldsymbol{w}^k \tag{5.2.51}$$

$$\boldsymbol{r}^{k+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{f} - A\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} \tag{5.2.52}$$

由 (5.2.43)~(5.2.44) 式或 (5.2.49)~(5.2.50) 式消去中间变量 $\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}}$ 可得 SSOR 格式. 例如将 (5.2.49) 式代入 (5.2.50) 式可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{w}^{k+1} &= \boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} + B_2\boldsymbol{r}^{k+\frac{1}{2}} \\ &= \boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} + B_2(\boldsymbol{f} - A\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}}) \\ &= \boldsymbol{w}^k + B_1\boldsymbol{r}^k + B_2(\boldsymbol{f} - A\boldsymbol{w}^k - AB_1\boldsymbol{r}^k) \\ &= \boldsymbol{w}^k + (B_1 + B_2 - B_2AB_1)\boldsymbol{r}^k \\ &= \boldsymbol{w}^k + B\boldsymbol{r}^k \end{aligned} \tag{5.2.53}$$

其中 $B = B_1 + B_2 - B_2AB_1$. 由 (5.2.46)~(5.2.48) 式及 $A = L + D + U$ 可算得

$$B = \omega(2-\omega)(D+\omega U)^{-1}D(D+\omega L)^{-1} \tag{5.2.54}$$

于是 SSOR 格式的迭代矩阵为

$$\begin{aligned} R_{SSOR} &= I - BA = I - (B_1 + B_2 - B_2AB_1)A = (I - B_2A)(I - B_1A) \\ &= (D+\omega U)^{-1}\left[(1-\omega)D - \omega L\right](D+\omega L)^{-1}\left[(1-\omega)D - \omega U\right] \end{aligned} \tag{5.2.55}$$

对分量形式, 首先由 (5.2.40) 式计算, 结果用 y_i^{k+1} 表示, 然后应用向后 SOR 迭代, 得到 x_i^{k+1}, 整个算法为

$$y_i^{k+1} = (1-\omega)y_i^{k+1} + \frac{\omega}{a_{ii}}(f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}y_j^{k-1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}y_j^k), \quad i = 1, \cdots, n \tag{5.2.56}$$

$$x_i^{k+1} = (1-\omega)y_i^{k+1} + \frac{\omega}{a_{ii}}(f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}y_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{k+1}), \quad i = n, \cdots, 1 \tag{5.2.57}$$

USSOR 的计算过程与 SSOR 类似, 第一步完全相同, 但第二步是采用不同的松弛因子 ω', 即第二步为

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = \bar{B}'_{SOR}\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} + B'_2\boldsymbol{f} \tag{5.2.58}$$

或

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = \boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}} + B'_2\boldsymbol{r}^{k+\frac{1}{2}} \tag{5.2.59}$$

其中

$$\bar{B}'_{SOR} = (D+\omega' U)^{-1}[(1-\omega')D - \omega' L] \tag{5.2.60}$$

$$B'_2 = \omega'(D+\omega' U)^{-1} \tag{5.2.61}$$

类似地, 由 (5.2.49) 式代入 (5.2.59) 式消去 $\boldsymbol{w}^{k+\frac{1}{2}}$, 可得

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = \boldsymbol{w}^k + B\boldsymbol{r}^k \tag{5.2.62}$$

其中 $B = B_1 + B_2' - B_2'AB_1$, 从而求得 USSOR 迭代的迭代矩阵

$$\begin{aligned} R_{USSOR} &= I - BA = I - (B_1 + B_2' - B_2'AB_1)A = (I - B_2'A)(I - B_1A) \\ &= (D + \omega' U)^{-1}\left[(1-\omega')D - \omega' L\right](D + \omega L)^{-1}[(1-\omega)D - \omega U] \quad (5.2.63) \end{aligned}$$

§5.2.5 其他迭代形式

前面我们将 A 分解成 $A = L + D + U$ 的形式, 这是一种较特殊的形式, 还可以分解成更一般的形式. 现将 A 分解成

$$A = P - N \tag{5.2.64}$$

其中 P 是非奇异矩阵. 例如对 Jacobi 迭代格式, 有

$$P = D, \quad N = -(L + U) \tag{5.2.65}$$

对 G-S 迭代, 有

$$P = L + D, \quad N = -U \tag{5.2.66}$$

对 SOR 迭代, 有

$$P = \frac{D}{\omega} + L, \ N = (\frac{1}{\omega} - 1)D - U \tag{5.2.67}$$

对 SSOR 迭代, 有

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{\omega(2-\omega)}(D + \omega L)D^{-1}(D + \omega U) \\ N &= \frac{1}{\omega(2-\omega)}[(1-\omega)D - \omega L]D^{-1}[(1-\omega)D - \omega U] \end{aligned} \tag{5.2.68}$$

由分解形式 (5.2.64) 可对矩阵方程 $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$ 构造迭代格式

$$P\boldsymbol{w}^{k+1} = N\boldsymbol{w}^k + \boldsymbol{f} \tag{5.2.69}$$

由于 P 非奇异, 故

$$\boldsymbol{w}^{k+1} = P^{-1}N\boldsymbol{w}^k + P^{-1}\boldsymbol{f} \tag{5.2.70}$$

显然迭代矩阵为 $R = P^{-1}N$. 由该式及 (5.2.64)~(5.2.66) 式可算出 Jacobi 迭代、G-S 迭代、SOR 迭代、SSOR 迭代的迭代矩阵, 与前面给出的均一致. 前三种很容易验证, 对 SSOR 迭代, 由 (5.2.55) 式并注意到 $B = P^{-1}$, 有

$$R_{SSOR} = I - BA = I - P^{-1}A = P^{-1}(P - A) = P^{-1}N$$

因此格式 (5.2.70) 的迭代矩阵不变, 前面收敛性的结论采用该迭代格式仍有效. 当然还有别的判断方法, 因为由定理 5.1.1 知, 当且仅当 $\rho(P^{-1}N) < 1$ 时, 迭代收敛. 下面的定理将说明如何判断 $\rho(P^{-1}N) < 1$.

定理 5.2.5 (Householder-John) 若 A 对称正定, $P+P^T-A$ 正定, 则 $\rho(P^{-1}N) < 1$.

证明 注意 $R = P^{-1}N = I - P^{-1}A$. 设 $I - P^{-1}A$ 的特征值和对应的特征向量分别为 λ 和 $\boldsymbol{z}$(其中 λ 为复数, $\boldsymbol{z} \neq 0$ 为复向量), 则

$$(I-\lambda)P\boldsymbol{z} = A\boldsymbol{z} \tag{5.2.71}$$

设 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{x} + i\boldsymbol{y}$, $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbf{R}^n)$. 由于内积 $(A\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}) \in \mathbf{R}^n$ 及 $A^T = A$, 所以

$$(A\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}) = (1-\lambda)(P\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}) = (1-\bar{\lambda})\overline{(P\boldsymbol{z},\boldsymbol{z})} = (1-\bar{\lambda})(\boldsymbol{z},P\boldsymbol{z}) = (1-\bar{\lambda})(P^T\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}) \tag{5.2.72}$$

于是

$$\left(\frac{1}{1-\lambda} + \frac{1}{1-\bar{\lambda}} - 1\right)(A\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}) = ((P+P^T-A)\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}) \tag{5.2.73}$$

取 (5.2.73) 式的实部, 得

$$\begin{aligned} &\frac{1-|\lambda|^2}{|1-\lambda|^2}[(A\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) + (A\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})] \\ =& ((P+P^T-A)\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) + ((P+P^T-A)\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}) \end{aligned} \tag{5.2.74}$$

由于 A 和 $(P+P^T-A)$ 正定, 故 $|\lambda| < 1$, 即 $\rho(P^{-1}N) < 1$

□

作为定理 5.2.5 的一个应用, 给出 SOR 迭代法收敛的一个充要条件.

定理 5.2.6 (Ostrowski-Reich) 若 A 对称正定, 则 SOR 迭代当且仅当 $0 < \omega < 2$ 收敛.

证明 对 SOR 迭代, 由 (5.2.67) 式知

$$P = \frac{D}{\omega} + L, \quad N = \left(\frac{1}{\omega} - 1\right)D - U \tag{5.2.75}$$

迭代矩阵为

$$R_{SOR} = P^{-1}N = \left(\frac{D}{\omega} + L\right)^{-1}\left[\left(\frac{1}{\omega} - 1\right)D - U\right] = (D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D - \omega U]$$

由于 A 对称, 所以 $U = L^T$, 故

$$P + P^T - A = \left(\frac{D}{\omega} + L\right)^T + \left(\frac{1}{\omega} - 1\right)D - U = \left(\frac{2}{\omega} - 1\right)D$$

从而 $P + P^T - A$ 当且仅当 $0 < \omega < 2$ 时正定, 由定理 5.2.5 知, $\rho(P^{-1}N) < 1$, 从而 SOR 迭代收敛.

□

由 $\omega = 1$ 时, SOR 迭代即为 G-S 迭代, 因此, 若 A 对称正定, 则 G-S 迭代收敛.

定理 5.2.7 若 A 对称正定, 则 SSOR 迭代收敛的充要条件是 $0<\omega<2$.

证明 对 SSOR 迭代, 由 A 的对称性知 $U=L^T$, 所以由 (5.2.68) 式得

$$
\begin{aligned}
P+P^T-A &= \frac{2}{\omega(2-\omega)}(D+\omega L)D^{-1}(D+\omega U)\\
&\quad+\frac{1}{\omega(2-\omega)}[(1-\omega)D-\omega L]D^{-1}[(1-\omega)D-\omega U]\\
&=\frac{1}{\omega(2-\omega)}[2D-2D\omega+\omega^2D+\omega^2U+\omega^2L+2\omega^2LD^{-1}U]\\
&\quad+\frac{2-\omega}{2\omega}D+\frac{2\omega}{2-\omega}(\frac{1}{2}D^{\frac{1}{2}}+LD^{-\frac{1}{2}})(\frac{1}{2}D^{\frac{1}{2}}+LD^{-\frac{1}{2}})^T
\end{aligned}
$$

其中 $D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}=D$, $D^{-\frac{1}{2}}=(D^{\frac{1}{2}})^{-1}$. (注意 D 是一个对角元素为正的矩阵). 因此 $P+P^T-A$ 是正定的当且仅当 $0<\omega<2$, 由定理 5.2.5 知, $\rho(P^{-1}N)<1$, 从而 SSOR 迭代收敛.

□

例 1 设方程 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$ 中的 A 和 $\boldsymbol{f}$ 分别为

$$
A=\begin{bmatrix}1 & 0 & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4}\\ 0 & 1 & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4}\\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & 1 & 0\\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & 0 & 1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{f}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\1\\1\\1\end{bmatrix}
$$

其解为 $\boldsymbol{x}=(1,1,1,1)^T$. 设 $\boldsymbol{x}^0=\boldsymbol{0}$. 试比较 Jacobi 迭代和 G-S 迭代的收敛速度.

解 易知 Jacobi 迭代和 G-S 迭代的迭代矩阵分别为

$$
R_J=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}0 & 0 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0 & 0\end{bmatrix}
$$

$$
R_{GS}=\begin{bmatrix}0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4}\\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4}\\ 0 & 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{8}\\ 0 & 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{8}\end{bmatrix}
$$

又设 e_J^n 和 e_{GS}^n 分别是第 n 次 Jacobi 迭代和 G-S 迭代的误差向量, 且 $e_J^0 = e_{GS}^0 = (-1,-1,-1,-1)^T$, 则

$$e_J^n = R_J^n e_J^0 = \frac{1}{2^n}\begin{bmatrix}1\\1\\1\\1\end{bmatrix}, \quad e_{GS}^n = R_{GS}^n e_{GS}^0 = -\frac{1}{4^n}\begin{bmatrix}2\\2\\1\\1\end{bmatrix}, \quad n \geqslant 1$$

所以

$$\|e_J^n\| = \frac{1}{2^{n-1}} > \|e_{GS}^n\| = \frac{\sqrt{10}}{4^n}, \quad n \geqslant 1 \tag{5.2.76}$$

因此对这里给定的 e^0, G-S 迭代的收敛速度要快于 Jacobi 迭代格式.

□

§5.3 预条件迭代方法

考虑矩阵方程 $Ax = f$, 并对 A 作 (5.3.1) 式的分解, 即

$$A = P - N, \quad \det(P) \neq 0 \tag{5.3.1}$$

为简便起见, 将迭代格式 (5.2.69) 记成

$$P\mathbf{x}^{k+1} = N\mathbf{x}^k + \mathbf{f}, \quad k \geqslant 0 \tag{5.3.2}$$

其中 x^0 给定. 易知关于误差的迭代方程

$$e^{k+1} = Re^k \tag{5.3.3}$$

或

$$e^{k+1} = R^k e^0 \tag{5.3.4}$$

其中 $R = P^{-1}N$ 为迭代矩阵, $e^k = x^k - x$ 为第 k 次迭代解与方程真解 x 之差, e^0 是初始误差. 为了后面的讨论, 先引进一些概念和定理.

定义 5.3.1 对任何矩阵模 $\|\cdot\|$, 非奇异矩阵 A 关于该模的条件数 $\chi(A)$ 是一个实数

$$\chi(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\| \tag{5.3.5}$$

用 $\chi_p(A)$ 表示矩阵 A 关于 $\|\cdot\|_p$ 的条件数, 当 $p = 2$ 时, $\chi_2(A)$ 称为 A 的**谱条件数**. 由于

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^TA)} = \sqrt{\max_i \lambda_i(A^TA)}$$

所以

$$\chi_2(A)=\sqrt{\frac{\max\limits_i \lambda_i(A^TA)}{\min\limits_i \lambda_i(A^TA)}}$$

若定义

$$\chi_{sp}(A)=\frac{\max\limits_i |\lambda_i(A)|}{\min\limits_i |\lambda_i(A)|} \tag{5.3.6}$$

则当 A 对称时, 显然 $\chi_2(A)=\chi_{sp}(A)$.

定义 5.3.2 一个矩阵 A 称为 N 稳定的或非稳定的, 若其所有特征值都有正的实部.

定理 5.3.1 迭代格式 (5.3.2) 的迭代矩阵 R 的谱半径 $\rho(R)<1$ 成立当且仅当 $I-R$ 非奇异, 且 $(I-R)^{-1}(I+R)$ 是 N 稳定的.

证明 *充分性* 设 $H=(I-R)^{-1}(I+R)$, 若 $I-R$ 非奇异, 则由

$$H+I=2(I-R)^{-1}, \quad H-I=2(I-R)^{-1}R$$

所以

$$R=(H+I)^{-1}(H-I)$$

设 λ 是 R 任一特征值, μ 为 H 的特征值, 则 $\mu=\dfrac{1-\lambda}{1+\lambda}$, 于是

$$\lambda=\frac{\mu-1}{\mu+1}=\frac{(\mathrm{Re}\mu-1)+\mathrm{iIm}\mu}{(\mathrm{Re}\mu+1)+\mathrm{iIm}\mu}$$

因此当且仅当 $\mathrm{Re}\mu<0$ 时, $|\lambda|<1$, 即 $\rho(R)<1$. 这里 $\mathrm{Re}\mu$ 和 $\mathrm{Im}\mu$ 表示分别对 μ 取实部和虚部.

必要性 若 $\rho(R)<1$, 则 $I-R$ 显然非奇异, 若 μ 是 H 的特征值, 则 $\lambda=\dfrac{\mu-1}{\mu+1}$ 是 R 的特征值, 由

$$\lambda=\frac{\mu-1}{\mu+1}=\frac{(\mathrm{Re}\mu-1)+\mathrm{iIm}\mu}{(\mathrm{Re}\mu+1)+\mathrm{iIm}\mu}$$

知当且仅当 $\mathrm{Re}\mu>0$ 时, 式 $|\lambda|<1$ 成立. 因此, H 是 N 稳定的.

□

§5.3.1 预条件 Richardson(PR) 法

迭代格式 (5.3.2) 可以等价地写成

$$P(\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^k)=\boldsymbol{r}^k, \quad \boldsymbol{r}^k=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}^k \tag{5.3.7}$$

这里 $\boldsymbol{r}^k$ 是第 k 步的残量. 在分解式 (5.3.1) 中的矩阵 P 被看作矩阵 A 的一个预条件子, 这里 P 要求是非奇异且易求逆.

对格式 (5.3.7) 作如下推广

$$P(\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^k)=\alpha\boldsymbol{r}^k \tag{5.3.8}$$

其中 $\alpha\neq 0$ 是一个实加速参数. 迭代格式 (5.3.8) 被称为**预条件 Richardson(PR) 法**. 若对所有 k, 参数 α 是常数, 则称为**定常 (Stationary) 预条件 Richardson(SPR) 法**; 假如参数 α 随迭代次数 k 改变, 则称为**动态 (Dynamical) 预条件 Richardson(DPR) 法**.

因为 (5.3.2) 式与 (5.3.7) 式等价, 我们也可以将 Jacobi 迭代、G-S 迭代、SOR 迭代和 SSOR 迭代看成定常预条件 Richardson 方法, 这时加速参数 $\alpha=1$, 由 (5.2.65)~(5.2.68) 知预条件子分别由下面四式给出

$$P_J=D \tag{5.3.9}$$

$$P_{GS}=D+L \tag{5.3.10}$$

$$P_{SOR}=\frac{D}{\omega}+L \tag{5.3.11}$$

$$P_{SSOR}=\frac{1}{\omega(2-\omega)}(D+\omega L)D^{-1}(D+\omega U) \tag{5.3.12}$$

预条件 Richardson(PR) 格式 (5.3.8) 可以用递推的形式表示. 设 $\boldsymbol{x}^0$ 已知, 计算 $\boldsymbol{r}^0=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}^0$, 然后对所有 $k\geqslant 0$ 按照下式进行迭代

$$\begin{aligned}&P\boldsymbol{z}^k=\boldsymbol{r}^k\\&\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k+\alpha\boldsymbol{z}^k\\&\boldsymbol{r}^{k+1}=\boldsymbol{r}^k-\alpha A\boldsymbol{z}^k\end{aligned} \tag{5.3.13}$$

其中 $\boldsymbol{z}^k$ 为中间变量. 易知, (5.3.13) 式与 (5.3.8) 式等价. 在每次迭代, (5.3.13) 式第一式要求求解一个系数矩阵为 P 的线性代数方程. 为求迭代矩阵, 将 (5.3.13) 式前两式合并, 得

$$\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k+\alpha P^{-1}\boldsymbol{r}^k=(I-\alpha P^{-1}A)\boldsymbol{x}^k+\alpha P^{-1}A \tag{5.3.14}$$

所以 SPR 法的迭代矩阵是

$$R_\alpha=I-\alpha P^{-1}A \tag{5.3.15}$$

命题 5.3.1 设 $P^{-1}A$ 对称正定, 则 SPR 方法的最优参数 α^* 为

$$\alpha^*=\frac{2}{\lambda_{\min}+\lambda_{\max}} \tag{5.3.16}$$

其中 $\lambda_{\min}$ 和 $\lambda_{\max}$ 分别为 $P^{-1}A$ 的最小和最大特征值. 当取 $\alpha=\alpha^*$ 时,SPR 的收敛性有如下估计

$$\|e^k\| \leqslant (\frac{\chi(P^{-1}A)+1}{\chi(P^{-1}A)+1})^k\|e^0\| \tag{5.3.17}$$

证明 设 λ_i 为 $P^{-1}A$ 的特征值,$\boldsymbol{v}_i$ 是对应的特征向量所给出的正交基, 则 $\boldsymbol{e}^k=\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}$ 可表示为 $\boldsymbol{e}^k=\sum\limits_{i=1}^n a_i\boldsymbol{v}_i$, 其中 a_i 为展开式的系数, 于是

$$\boldsymbol{e}^{k+1}=R_\alpha\boldsymbol{e}^k=\sum_{i=1}^n a_iR_\alpha\boldsymbol{v}_i=\sum_{i=1}^n a_i(1-\alpha\lambda_i)\boldsymbol{v}_i \tag{5.3.18}$$

α 的最优值 α^* 是使

$$|1-\alpha\lambda_{\min}|=|1-\alpha\lambda_{\max}|$$

成立的值, 因此解得

$$\alpha^*=\frac{2}{\lambda_{\min}+\lambda_{\max}}$$

这时有

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|\leqslant|1-\alpha\lambda_{\min}|\,\|\boldsymbol{e}^k\|=\frac{\lambda_{\max}-\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}\|\boldsymbol{e}^k\|$$

当 $P^{-1}A$ 对称正定时, 有 $\chi_{sp}(P^{-1}A)=\lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ 因此由上式可得

$$\|e^k\| \leqslant (\frac{\chi(P^{-1}A)+1}{\chi(P^{-1}A)+1})^k\|e^0\|$$

□

当 $P^{-1}A$ 不对称正定时, 只要 P 和 A 对称正定, 则通过定义如下的内积 $(\cdot,\cdot)_P$

$$(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})_P=(P\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}),\quad \|\boldsymbol{u}\|_P=\sqrt{(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})_P},\quad \forall\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in\mathbf{R}^n \tag{5.3.19}$$

由下面的引理知 $P^{-1}A$ 关于 $(\cdot,\cdot)_P$ 对称正定. 这里 $(\cdot,\cdot)_P$ 表示 $\mathbf{R}^n$ 中的标量积.

引理 5.3.1 (1) 若 P 对称正定, A 对称 (正定), 则 $P^{-1}A$ 关于 $(\cdot,\cdot)_P$ 对称 (正定). (2) 若 P 对称正定, A 对称, 则谱条件数 $\chi_{sp}(P^{-1}A)$ 等于 $P^{-1}A$ 在模 $\|\cdot\|_P$ 意义下的条件数.

证明 (1) 对所有 $\boldsymbol{u}\in\mathbf{R}^n$, $(P^{-1}A\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})_P=(A\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})$, 因此 $P^{-1}A$ 关于 $(.,.)_P$ 正定, 而且对任何 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in\mathbf{R}^n$, 因 A 和 P 对称, 所以

$$\begin{aligned}(P^{-1}A\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})_P&=(A\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})=(\boldsymbol{u},A\boldsymbol{v})=(P^{-1}P\boldsymbol{u},A\boldsymbol{v})\\&=(P\boldsymbol{u},P^{-1}A\boldsymbol{v})=(\boldsymbol{u},P^{-1}A\boldsymbol{v})_P\end{aligned}$$

因此 $P^{-1}A$ 关于 $(.,.)_P$ 对称.

(2) 注意

$$\|P^{-1}A\|_P=\rho(P^{-1}A)$$

因此

$$\chi_{sp}(P^{-1}A) = \frac{\max_i |\lambda_i|}{\min_i |\lambda_i|} = \rho(P^{-1}A)\rho(A^{-1}P) = \|P^{-1}A\|_P \|A^{-1}P\|_P$$

其中 λ_i 为 $P^{-1}A$ 的特征值.

□

定理 5.3.2 对任何非奇异矩阵 P, 定常预条件 Richardson 法当且仅当

$$|\lambda_i|^2 < \frac{2}{\alpha}\text{Re}\lambda_i, \quad i = 1, \cdots, n \tag{5.3.20}$$

收敛. 其中 λ_i 为 $P^{-1}A$ 的特征值.

证明 因为 SPR 法的迭代矩阵为 (5.3.15) 式, 即 $R_\alpha = I - \alpha P^{-1}A$, 所以

$$(I - R_\alpha)^{-1}(I + R_\alpha) = \frac{2}{\alpha}A^{-1}P - I$$

用 μ_i 表示 $A^{-1}P$ 的特征值, 由定理 5.3.1 知, 当且仅当 $\frac{2}{\alpha}\text{Re}\mu_i > 1 (i = 1, \cdots, n)$ 成立时, $\rho(R_\alpha) < 1$. 注意 $\lambda_i = \frac{1}{\mu_i}$, 即有 $|\lambda_i|^2 < \frac{2}{\alpha}\text{Re}\lambda_i (i = 1, \cdots, n)$.

□

由该定理, 很容易得到以下结论, 读者自己证明.

推论 5.3.1 若 $P^{-1}A$ 的特征值的实部符号有变化, 则定常预条件 Richardson 法不收敛.

推论 5.3.2 若 $P^{-1}A$ 有实特征值, 则定常预条件 Richardson 法当且仅当

$$1 < \frac{2}{\alpha\lambda_i}, \quad i = 1, \cdots, n \tag{5.3.21}$$

收敛, 其中 λ_i 为 $P^{-1}A$ 的特征值.

推论 5.3.3 若 $P^{-1}A$ 对称正定, 则定常预条件 Richardson 法当且仅当

$$0 < \alpha < \frac{2}{\lambda_{\max}} \tag{5.3.22}$$

收敛, 其中 $\lambda_{\max}$ 是 $P^{-1}A$ 的最大特征值.

§5.3.2 预条件 Richardson 极小残量 (PRMR) 法

假定 A 正定, P 对称正定, 由 (5.3.13) 式有

$$\boldsymbol{z}^{k+1} = \boldsymbol{z}^{k+1}(\alpha) = P^{-1}(\boldsymbol{r}^k - \alpha A\boldsymbol{z}^k)$$

因此

$$||z^{k+1}||_P^2 = ||P^{-1}r^k||_P^2 + \alpha^2||P^{-1}Az^k||_P^2 - 2\alpha(P^{-1}r^k, P^{-1}Az^k)_P \tag{5.3.23}$$

现在选择 $\alpha = \alpha_k$, 使得 $||z^{k+1}(\alpha)||_P^2$ 极小化, 也即

$$\frac{d}{d\alpha}(||z^{k+1}(\alpha)||_P^2)_{\alpha=\alpha_k} = 0 \tag{5.3.24}$$

从而

$$\alpha_k = \frac{(z^k, Az^k)}{(Az^k, P^{-1}Az^k)} \tag{5.3.25}$$

上式分子恒为正, 除非 $z^k = 0$. 当 $z^k = 0$ 时, $r^k = 0$, 也即 $x^k = x$ 是精确解. 在 SPR 迭代格式 (5.3.13) 中, 若 α 被 (5.3.25) 式的 α_k 替代, 则所得的迭代格式称为**预条件 Richardson 极小残量 (PRMR) 法**.

下面分析 PRMR 的收敛性. 首先利用 (5.3.23) 式和 (5.3.25) 式计算

$$\begin{aligned}
||z^k||_P^2 - ||z^{k+1}||_P^2 &= ||z^k||_P^2 - ||z^k||_P^2 - \alpha_k^2||P^{-1}Az^k||_P^2 + 2\alpha_k(z^k, P^{-1}Az^k)_P \\
&= 2\alpha_k(z^k, P^{-1}Az^k)_P - \alpha_k^2||P^{-1}Az^k||_P^2 \\
&= \frac{(Az^k, z^k)^2}{(P^{-1}Az^k, Az^k)}
\end{aligned}$$

由于 P 对称正定, 从而可知上式右端大于 0, 因此 $||z^k||_P$ 不增加且收敛, 所以

$$\frac{(Az^k, z^k)^2}{(P^{-1}Az^k, Az^k)} \to 0, \quad k \to \infty \tag{5.3.26}$$

又 A 正定, 所以存在 $\sigma > 0$ 使得 $(Aw, w) \geqslant \sigma||w||_2^2$ $(w \in \mathbf{R}^n)$, 这蕴含

$$\frac{(Az^k, z^k)^2}{(P^{-1}Az^k, Az^k)} \geqslant \frac{\sigma^2||z^k||_2^4}{||P^{-1}A||_2||A||_2||z^k||_2^2} = \frac{\sigma^2||z^k||_2^2}{||P^{-1}A||_2||A||_2}$$

也即 $||z^k||_2 \to 0$, 所以 $||r^k||_2 \to 0$, 从而 $x^k \to x = A^{-1}f$, 这里 $||\cdot||_2$ 是矩阵的 Euchlid 范数.

§5.3.3 预条件 Richardson 最速下降 (PRSD) 法

假若 A 对称正定, 则可构造预条件 Richardson 最速下降 (PRSD) 法. 因

$$r^k = f - Ax^k = A(x - x^k) = -Ae^k \tag{5.3.27}$$

其中 e^k 是迭代解 x^k 与真解 x 的误差, 又由 (5.3.3) 式和 (5.3.15) 式知, 对 SPR 方法有

$$e^{k+1} = e^{k+1}(\alpha) = (I - \alpha P^{-1}A)e^k$$

所以

$$\begin{aligned}\|e^{k+1}\|_A^2 &= (Ae^{k+1}, e^{k+1}) = -(r^{k+1}, e^{k+1}) = -(r^k - \alpha Az^k, (I - \alpha P^{-1}A)e^k) \\ &= -(r^k, e^k) + \alpha[(r^k, P^{-1}Ae^k) + (Az^k, e^k)] - \alpha^2(Az^k, P^{-1}Ae^k)\end{aligned}$$

在 (5.3.13) 式中, 选取 $\alpha = \alpha_k$ 使得

$$\frac{d}{d\alpha}\left(\|\mathrm{e}^{k+1}(\alpha)\|_A^2\right)_{\alpha=\alpha_k} = 0$$

则所得的迭代格式即为**PRSD 迭代**.

记 $x^{k+1}(\alpha) = x^k + \alpha z^k$, 这等价于极小化 $\phi(x^{k+1}(\alpha))$, 其中 $\phi(w)$ 是二次函数

$$\phi(w) = \frac{1}{2}(Aw, w) - (f, w)$$

经计算得

$$\alpha_k = \frac{1}{2}\frac{(r^k, P^{-1}Ae^k) + (Az^k, e^k)}{(Az^k, P^{-1}Ae^k)} = \frac{1}{2}\frac{(r^k, z^k) + (Az^k, A^{-1}r^k)}{(Az^k, z^k)}$$

因此

$$\alpha_k = \frac{(z^k, r^k)}{(z^k, Az^k)} \tag{5.3.28}$$

同样分子不为零, 除非 $r^k = 0$.

当 P 是单位矩阵时, $z^k = r^k$, 在这种情况下, (5.3.28) 式成为

$$\alpha_k = \frac{\|r^k\|_2^2}{(r^k, Ar^k)}$$

(5.3.13) 式中第二式变成

$$x^{k+1} = x^k + \frac{\|r^k\|_2^2}{(r^k, Ar^k)}r^k \tag{5.3.29}$$

这称为**梯度法**或**Richardson 最速下降法**. 当 P 不为单位阵时, 迭代格式 (5.3.13) 式采用 (5.3.28) 式的 α_k 也称为**预条件梯度法** 或**预条件** Richardson **最速下降法**.

§5.3.4 共轭梯度 (CG) 法

假定 A 对称正定, 则容易证明, 求解 $Ax = f$ 等价于极小化二次泛函

$$\phi(w) = \frac{1}{2}(Aw, w) - (f, w) \tag{5.3.30}$$

实际上, ϕ 的极小值是 $-\frac{1}{2}(A^{-1}f, f)$, 它在 $x = A^{-1}f$ 处达到, 同样注意到

$$r^k = -\nabla\phi(x^k) \tag{5.3.31}$$

也即 (5.3.27) 式中定义的残量是 ϕ 在 $\boldsymbol{x}^k$ 处的负梯度.

当 $P=I$ 时, Richardson 法总是通过在 ϕ 的负梯度方向的增量来修正

$$\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k+\alpha_k\boldsymbol{r}^k \tag{5.3.32}$$

在共轭梯度 (CG) 法中, 迭代的修正也是由 (5.3.32) 式得到, 但 $\boldsymbol{r}^k$ 取代成一个与梯度方向不平行的新方向 $\boldsymbol{p}^k$.

定义 5.3.3 方向 $\{\boldsymbol{p}^k\}$ 称为 A-共轭, 若满足正交性质 $(\boldsymbol{p}^j,A\boldsymbol{p}^m)=0\ (m\neq j)$. 特别地

$$(\boldsymbol{p}^{k+1},A\boldsymbol{p}^k)=0,\quad \forall k\in N \tag{5.3.33}$$

设 $\boldsymbol{p}^0,\cdots,\boldsymbol{p}^m$ 是线性无关向量, $\boldsymbol{x}^0$ 是一个初始猜测, 构造序列

$$\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k+\alpha_k\boldsymbol{p}^k,\quad 0\leqslant k\leqslant m \tag{5.3.34}$$

其中 α_k 是非负实数, 则 $\boldsymbol{x}^{k+1}$ 在 $k+1$ 维超平面上极小化泛函 $\phi(\boldsymbol{w})$

$$\boldsymbol{w}=\boldsymbol{x}^0+\sum_{j=0}^{k}\gamma_j\boldsymbol{p}^j,\quad \gamma_j\in\mathbf{R}$$

当且仅当 $\boldsymbol{p}^j$ 是 A- 共轭, 且 $\alpha_k=\dfrac{(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)}$. 因此形成如下 **CG 算法**.

CG 算法

设 $\boldsymbol{x}^0$ 是初始猜测, $\boldsymbol{r}^0=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}^0$, 令 $\boldsymbol{p}^0=\boldsymbol{r}^0$, 对每个 $k\in N$, 按如下公式进行第 k 次迭代

$$\begin{aligned}
&\alpha_k=\frac{(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)}=\frac{\|\boldsymbol{r}^k\|_2^2}{(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)}\\
&\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k+\alpha_k\boldsymbol{p}^k\\
&\boldsymbol{r}^{k+1}=\boldsymbol{r}^k-\alpha_kA\boldsymbol{p}^k\\
&\beta_{k+1}=-\frac{(\boldsymbol{r}^{k+1},A\boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)}=\frac{\|\boldsymbol{r}^{k+1}\|_2^2}{\|\boldsymbol{r}^k\|_2^2}\\
&\boldsymbol{p}^{k+1}=\boldsymbol{r}^{k+1}+\beta_{k+1}\boldsymbol{p}^k
\end{aligned} \tag{5.3.35}$$

定理 5.3.3 CG 算法的向量组 $\{\boldsymbol{r}^k\}$ 和 $\{\boldsymbol{p}^k\}$ 具有性质

$$(\boldsymbol{p}^i,\boldsymbol{r}^j)=0,\qquad 0\leqslant i<j\leqslant k \tag{5.3.36}$$

$$(\boldsymbol{p}^i,A\boldsymbol{p}^j)=0,\qquad i\neq j,\ 0\leqslant i,j\leqslant k \tag{5.3.37}$$

$$(\boldsymbol{r}^i,\ \boldsymbol{r}^j)=0,\qquad i\neq j,\ 0\leqslant i,j\leqslant k \tag{5.3.38}$$

证明 用数学归纳法证明.

1. 当 $k=1$ 时, 注意

$$\boldsymbol{p}^0=\boldsymbol{r}^0,\quad \boldsymbol{r}^1=\boldsymbol{r}^0-\alpha_0 A\boldsymbol{p}^0,\quad \boldsymbol{p}^1=\boldsymbol{r}^1+\beta_1\boldsymbol{p}^0$$

$$\alpha_0=\frac{(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{p}^0)}{(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)}=\frac{(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0)}{\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)},\quad \beta_1=\frac{(\boldsymbol{r}^1,A\boldsymbol{p}^0)}{(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)}$$

所以

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{r}^1)&=(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0-\alpha_0A\boldsymbol{p}^0)=(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0)-\alpha_0(\boldsymbol{r}^0,A\boldsymbol{p}^0)\\&=(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0)-\frac{(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0)}{(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)}(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)=0\end{aligned}$$

$$(\boldsymbol{p}^1,A\boldsymbol{p}^0)=(\boldsymbol{r}^1+\beta_1\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)=(\boldsymbol{r}^1,A\boldsymbol{p}^0)-\frac{(\boldsymbol{r}^1,A\boldsymbol{p}^0)}{(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)}(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)=0$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}^1,\boldsymbol{r}^0)&=(\boldsymbol{r}^0-\alpha_0A\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{r}^0)=(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0)-\frac{(\boldsymbol{r}^0,A\boldsymbol{p}^0)}{(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)}(A\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{r}^0)\\&=(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0)-\frac{(\boldsymbol{r}^0,\boldsymbol{r}^0)}{(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)}(\boldsymbol{p}^0,A\boldsymbol{p}^0)=0\end{aligned}$$

因此当 $k=1$ 时, 结论 (5.3.36)~(5.3.38) 均成立.

2. 假设当 k 时, (5.3.36)~(5.3.38) 式均成立, 下面证明 $k=k+1$ 时, 结论仍成立.

(1) 取 $0\leqslant i<j\leqslant k+1$.

当 $0\leqslant i\leqslant k-1$ 时, 由归纳法假定知 $(\boldsymbol{p}^i,\boldsymbol{r}^{k+1})=(\boldsymbol{p}^i,\boldsymbol{r}^k)-\alpha_k(\boldsymbol{p}^i,A\boldsymbol{r}^k)=0$.

当 $i=k$ 时

$$(\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{r}^{k+1})=(\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{r}^k)-\frac{(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)}(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)=0$$

因此当 $k+1$ 时, (5.3.36) 式成立, 得证.

(2) 取 $0\leqslant i,j\leqslant k+1(i\neq j)$.

当 $j=k+1,\ 0\leqslant i\leqslant k-1$ 时, 由 (5.3.36) 式知

$$(\boldsymbol{p}^i,A\boldsymbol{p}^{k+1})=\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{p}^i,\boldsymbol{r}^k-\boldsymbol{r}^{k+1})=\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{p}^i,\boldsymbol{r}^k)-\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{p}^i,\boldsymbol{r}^{k+1})=0,\quad \alpha_k\neq 0$$

若 $\alpha_k=0$, 则 $\boldsymbol{r}^k=\boldsymbol{p}^k=0$, 再由 A 的对称性知 $(\boldsymbol{p}^{k+1},A\boldsymbol{p}^i)$ 也成立.

当 $j=k,\ i=k+1$ 时

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}^{k+1},A\boldsymbol{p}^k)&=(\boldsymbol{r}^{k+1}+\beta_{k+1}\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)=(\mathrm{r}^{k+1},A\boldsymbol{p}^k)+\beta_{k+1}(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)\\&=(\boldsymbol{r}^{k+1},A\boldsymbol{p}^k)-\frac{(\boldsymbol{r}^{k+1},A\boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)}(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)=0\end{aligned}$$

因此当 $k+1$ 时, (5.3.37) 式也成立. 因此 (5.3.37) 式成立, 得证.

(3) 当 $i=k+1, 0\leqslant j\leqslant k-1$ 时, 由归纳假设知

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}^{k+1},\boldsymbol{r}^j)&=(\boldsymbol{r}^k-\alpha_k A\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{r}^j)=(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{r}^j)-\alpha_k(A\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{r}^j)\\&=(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{r}^j)-\alpha_k(A\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{p}^j-\beta_j\boldsymbol{p}^{j-1})\\&=(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{r}^j)-\alpha_k(A\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{p}^j)+\alpha_k\beta_j(A\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{p}^{j-1})=0\end{aligned}$$

当 $i=k+1, j=k$ 时, 注意 $(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)=(\boldsymbol{r}^k,A\boldsymbol{p}^k)$, 这事实上由 (5.3.37) 式得到

$$(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)=(\boldsymbol{r}^k+\beta_k\boldsymbol{p}^{k-1},A\boldsymbol{p}^k)=(\boldsymbol{r}^k,A\boldsymbol{p}^k)\tag{5.3.39}$$

所以再由 (5.3.36) 式, 有

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}^{k+1},\boldsymbol{r}^k)&=(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{r}^k)-\alpha_k(A\boldsymbol{p}^k,\boldsymbol{r}^k)\\&=(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{r}^k)-\frac{(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)}(\boldsymbol{p}^k,A\boldsymbol{p}^k)\\&=(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{r}^k-\boldsymbol{p}^k)=-\beta_{k-1}(\boldsymbol{r}^k,\boldsymbol{p}^{k-1})=0\end{aligned}\tag{5.3.40}$$

即 $(\boldsymbol{r}^{k+1},\boldsymbol{r}^k)=0$.

所以对 $k+1$, (5.3.38) 式也成立. 因此 (5.3.38) 式成立, 得证.

□

定义 5.3.4 称

$$K_k(A,\boldsymbol{r}^0)=\mathrm{span}\{\boldsymbol{r}^0,A\boldsymbol{r}^0,\cdots,A^{k-1}\boldsymbol{r}^0\}\tag{5.3.41}$$

是由 $\boldsymbol{r}^0$ 和 A 生成的 k 阶 Krylov 空间.

定理 5.3.4 对 CG 算法, 有

$$\mathrm{span}\{\boldsymbol{r}^0,\cdots,\boldsymbol{r}^k\}=\mathrm{span}\{\boldsymbol{p}^0,\cdots,\boldsymbol{p}^k\}=K_{k+1}(A,\boldsymbol{r}^0)\tag{5.3.42}$$

证明 (1) 首先证明

$$\mathrm{span}\{\boldsymbol{r}^0,\cdots,\boldsymbol{r}^k\}=\mathrm{span}\{\boldsymbol{p}^0,\cdots,\boldsymbol{p}^k\},\qquad k\geqslant 0\tag{5.3.43}$$

因为 $\boldsymbol{p}^0=\boldsymbol{r}^0$, 且由 $\boldsymbol{p}^{k+1}=\boldsymbol{r}^{k+1}+\beta_{k+1}\boldsymbol{p}^k$ 知, $\{\boldsymbol{p}^k\}$ 与 $\{\boldsymbol{r}^k\}$ 两序列可以相互线性表示, 又由定理 5.3.3 的 (5.3.37) 式和 (5.3.38) 式 (注意 A 对称正定) 知, $\{\boldsymbol{p}^k\}$ 与 $\{\boldsymbol{r}^k\}$ 两序列均线性无关, 因此 (5.3.43) 式成立.

(2) 下面用数学归纳法证明

$$\mathrm{span}\{\boldsymbol{p}^0,\cdots,\boldsymbol{p}^k\}=K_{k+1}(A,\boldsymbol{r}^0)\tag{5.3.44}$$

当 $k=1$ 时, 由 $\boldsymbol{p}^0=\boldsymbol{r}^0$ 及

$$\boldsymbol{p}^1=\boldsymbol{r}^1+\beta_1\boldsymbol{p}^0=(\boldsymbol{r}^0-\alpha_0A\boldsymbol{p}^0)+\beta_1\boldsymbol{p}^0=\boldsymbol{r}^0+\beta_1\boldsymbol{r}^0-\alpha_0A\boldsymbol{r}^0$$

知

$$\text{span}\{\boldsymbol{p}^0, \boldsymbol{p}^1\} = \text{span}\{\boldsymbol{r}^0, A\boldsymbol{r}^0\}$$

成立.

假设取 k 成立, 也即结合 (5.3.43) 式和 (5.3.44) 式有下式成立

$$\text{span}\{\boldsymbol{r}^0, \cdots, \boldsymbol{r}^k\} = \text{span}\{\boldsymbol{p}^0, \cdots, \boldsymbol{p}^k\} = K_{k+1}(A, \boldsymbol{r}^0) \tag{5.3.45}$$

由该式知

$$\boldsymbol{r}^k \in K_{k+1}(A, \boldsymbol{r}^0), \quad \boldsymbol{p}^k \in K_{k+1}(A, \boldsymbol{r}^0)$$

所以

$$A\boldsymbol{p}^k \in \text{span}\{A\boldsymbol{r}^0, \cdots, A^{k+2}\boldsymbol{r}^0\}$$

从而

$$\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k A\boldsymbol{p}^k \in \text{span}\{\boldsymbol{r}^0, A\boldsymbol{r}^0, \cdots, A^{k+2}\boldsymbol{r}^0\} = K_{k+2}(A, \boldsymbol{r}^0) \tag{5.3.46}$$

又由归纳假设 (5.3.45) 式知

$$A^k\boldsymbol{r}^0 \in \text{span}\{\boldsymbol{p}^0, \boldsymbol{p}^1, \cdots, \boldsymbol{p}^k\}$$

所以

$$A^{k+1}\boldsymbol{r}^0 \in \text{span}\{A\boldsymbol{p}^0, A\boldsymbol{p}^1, \cdots, A\boldsymbol{p}^k\}$$

于是由 $\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k A\boldsymbol{p}^k$ 知

$$A^{k+1}\boldsymbol{r}^0 \in \text{span}\{\mathbf{r}^0, \boldsymbol{r}^1, \cdots, \boldsymbol{r}^{k+1}\} \tag{5.3.47}$$

因此由 (5.3.43) 式, (5.3.46) 式, (5.3.47) 式知

$$\text{span}\{\boldsymbol{p}^0, \boldsymbol{p}^1, \cdots, \boldsymbol{p}^k\} = K_{k+2}(A, \boldsymbol{r}^0)$$

也即取 $k+1$ 时 (5.3.44) 也成立. (5.3.44) 式得证.

综合 (5.3.43) 式与 (5.3.44) 式有

$$\text{span}\{\boldsymbol{r}^0, \cdots, \boldsymbol{r}^k\} = \text{span}\{\boldsymbol{p}^0, \cdots, \boldsymbol{p}^k\} = K_{k+1}(A, \boldsymbol{r}^0)$$

□

注记

1. 在实际计算中, α_k 和 β_{k+1} 的计算采用更简单的形式, 即

$$\alpha_k = \frac{\|\boldsymbol{r}^k\|_2^2}{(\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k)}, \quad \beta_{k+1} = \frac{\|\boldsymbol{r}^{k+1}\|_2^2}{\|\boldsymbol{r}^k\|_2^2} \tag{5.3.48}$$

因为由定理 5.3.3 的 (5.3.36) 式及证明中的 (5.3.39) 式知有

$$(\boldsymbol{p}^k, \boldsymbol{r}^{k+1}) = 0, \quad (\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k) = (\boldsymbol{r}^k, A\boldsymbol{p}^k), \quad (\boldsymbol{r}^k, \boldsymbol{r}^{k+1}) = 0$$

于是

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k, \boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k)} = \frac{(\boldsymbol{r}^k, \boldsymbol{r}^k + \beta_k \boldsymbol{p}^{k-1})}{(\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k)} = \frac{(\boldsymbol{r}^k, \boldsymbol{r}^k) + \beta_k(\boldsymbol{r}^k, \boldsymbol{p}^{k-1})}{(\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k)} = \frac{\|\boldsymbol{r}^k\|_2^2}{(\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k)}$$

$$\begin{aligned}\beta_{k+1} &= -\frac{(\boldsymbol{r}^{k+1}, A\boldsymbol{p}^k)}{(\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k)} = -\frac{(\boldsymbol{r}^{k+1}, \alpha_k^{-1}(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1}))}{(\boldsymbol{r}^k, A\boldsymbol{p}^k)} \\ &= \frac{\alpha_k^{-1}(\boldsymbol{r}^{k+1}, \boldsymbol{r}^{k+1})}{(\boldsymbol{r}^k, \alpha_k^{-1}(\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k+1}))} = \frac{\|\boldsymbol{r}^{k+1}\|_2^2}{\|\boldsymbol{r}^k\|_2^2}\end{aligned}$$

因此 (5.3.48) 式成立.

2. 对某固定的 $\boldsymbol{p}^k$, 令

$$\boldsymbol{e}^{k+1}(\alpha) = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{p}^k) - \boldsymbol{x}$$

则 α_k 满足

$$\frac{d}{d\alpha}(\|\mathrm{e}^{k+1}(\alpha)\|_A^2)_{\alpha=\alpha_k} = 0$$

也即 α_k 是极小化泛函 $\phi(e^{k+1})$ 的最优参数, 而 β_{k+1} 则保证满足 $(\boldsymbol{p}^{k+1}, A\boldsymbol{p}^k) = 0$.

3. 当向量 $\boldsymbol{r}^k = 0$ 时, 由 (5.3.48) 式知, $\alpha_k = 0$, 所以 $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{p}^k = \boldsymbol{x}^k$, 这表明第 k 步迭代的解 $\boldsymbol{x}^k$ 即为方程的精确解.

4. 当 $A_{n\times n}$ 对称正定时, 由于 $\mathbf{R}^n$ 空间中至多有 n 个相互正交的非零向量, 而由定理 5.3.3 知, 向量 $\boldsymbol{r}^0, \boldsymbol{r}^1, \cdots, \boldsymbol{r}^k$ 相互正交, 所以当 $k \leqslant n$ 时, 向量序列 $\{\boldsymbol{r}^k\}$ 中至少有一向量 $\boldsymbol{r}^k = 0$ $(k \leqslant n)$, 这表明 $\boldsymbol{x}^k = A^{-1}\boldsymbol{f}$. 因此理论上 CG 算法最多 n 步迭代就可得方程组的精确解.

定理 5.3.5 CG 迭代的收敛性有如下估计

$$\|\boldsymbol{e}^k\|_A \leqslant 2\left(\frac{\sqrt{\chi_{sp}(A)} - 1}{\sqrt{\chi_{sp}(A)} + 1}\right)^k \|\boldsymbol{e}^0\|_A \tag{5.3.49}$$

其中 $\chi_{sp}(A)$ 表示 A 的谱条件数.

证明 首先由 CG 算法 (5.3.35) 第二式, 有

$$\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^0 = \sum_{s=0}^{k} \alpha_s \boldsymbol{p}^s \in \mathrm{span}\{\boldsymbol{p}^0, \boldsymbol{p}^1, \cdots, \boldsymbol{p}^k\}$$

取 $0 \leqslant i \leqslant k$, 根据定理 5.3.3 中的性质, 有

$$\begin{aligned}(A\boldsymbol{p}^i, \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^0) &= \alpha_i(A\boldsymbol{p}^i, \boldsymbol{p}^i) = (\boldsymbol{p}^i, \boldsymbol{r}^i - \boldsymbol{r}^{i+1}) = (\boldsymbol{p}^i, \boldsymbol{r}^i) \\ &= (A\boldsymbol{p}^i, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^i) = (A\boldsymbol{p}^i, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^0 - \sum_{s=0}^{i-1} \alpha_s \boldsymbol{p}^s) = (A\boldsymbol{p}^i, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^0)\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{x}$ 表示真解 $A^{-1}\boldsymbol{f}$. 上式表明 $\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^0$ 是 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0$ 在由 $\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p}^1,\cdots,\boldsymbol{p}^k$ 张成的空间上的正交投影, 其中投影标量积取 $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})_A=(A\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$.

因此, 根据定理 5.3.4, $\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^0$ 是 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0$ 在 $K_{k+1}(A,\boldsymbol{r}^0)$ 上的投影, 且

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{k+1}\|_A=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0-(\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^0)\|_A=\min_{\boldsymbol{w}\in K_{k+1}(A,\boldsymbol{r}^0)}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{w}\|_A \quad (5.3.50)$$

因为 $\boldsymbol{r}^0=A(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0)$, 所以对任何 $\boldsymbol{w}\in K_{k+1}(A,\boldsymbol{r}^0)$, $\boldsymbol{w}$ 可写成

$$\boldsymbol{w}=\sum_{j=1}^{k+1}\gamma_j A^j(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0)$$

因此

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{k+1}\|_A=\min_{p\in P_{k+1}^*}\|p(A)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0)\|_A$$

其中 P_{k+1}^* 是次数不超过 $k+1$ 的多项式集合, 且 $p(0)=1$.

由假定, $A=A^T>0$. 我们知道存在一个由 A 的特征向量给出的一个正交基, 并知道 A 的特征值 $\lambda_j>0$, 将 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0$ 关于这些特征向量展开, 得

$$\|p(A)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0)\|_A\leqslant\max_{1\leqslant j\leqslant n}|p(\lambda_j)|\ \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0\|_A$$

因此 (5.3.50) 式为

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{k+1}\|_A\leqslant\min_{\bar{\boldsymbol{w}}\in K_{k+1}(A,\boldsymbol{r}^0)}\max_{1\leqslant j\leqslant n}|p(\lambda_j)|\ \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^0\|_A \quad (5.3.51)$$

由 Chebyshev 多项式逼近定理, 最优化问题

$$\min_{p\in P_{k+1}^*}\max_{1\leqslant j\leqslant n}|p(\lambda_j)|$$

有唯一解.

$$p(x)=\frac{T_{k+1}(\dfrac{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}-2x}{\lambda_{\max}-\lambda_{\min}})}{T_{k+1}(\dfrac{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}-\lambda_{\min}})},\quad x\in[\lambda_{\min},\lambda_{\max}]$$

其中 $T_{k+1}(x)$ 是 $k+1$ 次 Chebyshev 多项式. 由 Chebyshev 多项式性质知 $|T_{k+1}(y)|\leqslant 1$ $(|y|\leqslant 1)$, 所以有

$$\max_{x\in[\lambda_{\min},\lambda_{\max}]}|p(x)|\leqslant\left[T_{k+1}(\frac{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}-\lambda_{min}})\right]^{-1}$$

计算该表达式, 得到

$$\begin{aligned}\max_{x\in[\lambda_{\min},\lambda_{\max}]}|p(x)|&\leqslant 2\left[1+\left(\frac{\sqrt{\lambda_{\max}}-\sqrt{\lambda_{\min}}}{\sqrt{\lambda_{\max}}+\sqrt{\lambda_{\min}}}\right)^{2k+2}\right]^{-1}\left(\frac{\sqrt{\lambda_{\max}}-\sqrt{\lambda_{\min}}}{\sqrt{\lambda_{\max}}+\sqrt{\lambda_{\min}}}\right)^{k+1}\\&\leqslant 2\left(\frac{\sqrt{\chi_{sp}(A)}-1}{\sqrt{\chi_{sp}(A)}+1}\right)^{k+1}\end{aligned}$$

代入 (5.3.51) 式, 得

$$\|\boldsymbol{e}^{k+1}\|_A \leqslant 2\left(\frac{\sqrt{\chi_{sp}(\tilde{A})}-1}{\sqrt{\chi_{sp}(\tilde{A})}+1}\right)^{k+1}\|\boldsymbol{e}^0\|_A$$

也即 (5.3.49) 式成立.

□

§5.3.5 预条件共轭梯度 (PCG) 法

当 $\chi_{sp}(A)$ 较大时, 最好采用预条件. 预处理共轭梯度法是先把原方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$ 转化成一个良态的等价方程组

$$\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}}=\tilde{\boldsymbol{f}} \tag{5.3.52}$$

其中 $\tilde{A}=C^{-1}AC^{-1}$, $\tilde{\boldsymbol{x}}=C\boldsymbol{x}$, $\tilde{\boldsymbol{f}}=C^{-1}\boldsymbol{f}$, C 为对称正定矩阵, 然后再对方程 (5.3.52) 用 CG 算法, 之所以可用 CG 算法是因为这时矩阵 $\tilde{A}$ 关于通常的欧氏标量积是对称正定的. 类似 CG 算法, 方程 (5.3.52) 的 CG 算法为

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{\|\tilde{\boldsymbol{r}}^k\|_2}{(\tilde{\boldsymbol{p}}^k, A\tilde{\boldsymbol{p}})}\\
\tilde{\boldsymbol{x}}^{k+1} &= \tilde{\boldsymbol{x}}^k+\alpha_k\tilde{\boldsymbol{p}}^k\\
\tilde{\boldsymbol{r}}^{k+1} &= \tilde{\boldsymbol{r}}^k-\alpha_k A\tilde{\boldsymbol{p}}^k\\
\beta_{k+1} &= \frac{\|\tilde{\boldsymbol{r}}^{k+1}\|_2^2}{\tilde{\boldsymbol{r}}\|_2^2}\\
\tilde{\boldsymbol{p}}^{k+1} &= \tilde{\boldsymbol{r}}^{k+1}+\beta_{k+1}\tilde{\boldsymbol{p}}^k
\end{aligned} \tag{5.3.53}$$

其中 $\tilde{\boldsymbol{r}}^0=\tilde{\boldsymbol{f}}-\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}}^0$, $\tilde{\boldsymbol{p}}^0=\tilde{\boldsymbol{r}}^0$. 显然在用 (5.3.53) 式计算时, 需要预先算出 $\tilde{A}$ 和$\tilde{\boldsymbol{f}}$, 算出 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 后还要通过关系式 $\boldsymbol{x}=C^{-1}\tilde{\boldsymbol{x}}$ 来得到 $\boldsymbol{x}$, 这都涉及到计算 C^{-1}. 为了避免计算 C^{-1}, 我们令

$$\tilde{\boldsymbol{p}}^k=Cp^k,\qquad \tilde{\boldsymbol{x}}^k=C\boldsymbol{x}^k,\qquad \tilde{\boldsymbol{r}}^k=C^{-1}\boldsymbol{r}^k$$

并代入到 (5.3.53) 式中整理, 并记 $P=C^2$, 则得如下**预条件共轭梯度 (PCG) 法算法**

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{(\boldsymbol{z}^k,\boldsymbol{r}^k)}{(\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^k)}\\
\boldsymbol{x}^{k+1} &= \boldsymbol{x}^k+\alpha_k\boldsymbol{p}^k\\
\boldsymbol{r}^{k+1} &= \boldsymbol{r}^k-\alpha_k A\boldsymbol{p}^k\\
P\boldsymbol{z}^{k+1} &= \boldsymbol{r}^{k+1}\\
\beta_{k+1} &= \frac{(\boldsymbol{z}^{k+1},\boldsymbol{r}^{k+1})}{(\boldsymbol{z}^k,\boldsymbol{r}^k)}\\
\boldsymbol{p}^{k+1} &= z^{k+1}+\beta_{k+1}\boldsymbol{p}^k
\end{aligned} \tag{5.3.54}$$

其中 x^0 为初始猜测, $r^0 = f - Ax^0$, $p^0 = z^0 = P^{-1}r^0$. 注意预条件子 P 是一个对称正定矩阵.

对 PCG 法, 误差估计式与 CG 法类似, 有

定理 5.3.6

$$\|e^k\|_A \leqslant 2\left(\frac{\sqrt{\chi_{sp}(P^{-1}A)}-1}{\sqrt{\chi_{sp}(P^{-1}A)}+1}\right)^k \|e^0\|_A, \quad k \in N \tag{5.3.55}$$

其中 $\chi_{sp}(P^{-1}A)$ 为 $P^{-1}A$ 的谱条件数.

证明过程与 CG 法类似, 只要将欧氏标量积 (u, v) 用预条件子 P 诱导的标量积 $(u, v)_P$ 替代, 矩阵 A 用 $P^{-1}A$ 替代, 残差 r^k 由 $z^k = P^{-1}r^k$ 替代即可. 读者自己完成.

§5.3.6 预条件子

由前面的收敛性估计知道, 迭代的优劣很大程度上依赖矩阵的条件数. 如果系数矩阵 A 是良态的, 共轭梯度法很有效. 对病态方程组, 基本思想是采用一个预条件子也即一个非奇异矩阵 P 来考虑等价的方程组

$$P^{-1}Ax = P^{-1}f \tag{5.3.56}$$

一个好的预条件子 P 的基本要求是 P^{-1} 容易计算, 而且 $P^{-1}A$ 的条件数一定比 A 小. 假如 $P^{-1}A$ 的条件数关于 n (矩阵 A 的阶数) 一致有界, 则称 P 是**最优预条件子**.

(5.3.56) 式中的 $P^{-1}A$ 可能不是对称或正定的. 然而, 假如 P 和 A 是对称正定的, 则由引理 5.3.1 知, $P^{-1}A$ 关于 $(.,.)_P$ 对称正定, 因此可直接对 (5.3.56) 式应用共轭梯度法, 只要 A 用 $P^{-1}A$ 代替, f 用 $P^{-1}f$ 代替, r^k 用 $z^k = P^{-1}r^k$ 代替, $(\cdot,\cdot)$ 用 $(\cdot,\cdot)_P$ 代替, 及 $\|\cdot\|$ 用 $\|\cdot\|_P$ 代替即可, 具体算法略.

为了得到系数矩阵是对称正定的等价方程组, 可以采用两种方法. 第一种是将预条件子 P 写成

$$P = C^2 \tag{5.3.57}$$

的形式, 其中 C 是对称非奇异阵, 假如取 P 的平方根. P 的平方根 $\sqrt{P}$ 可如下计算. 因为 P 可以写成 $P = T\Lambda T^T$, 其中 $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$ 是由 P 的特征值构成的对角阵, T 是由右特征向量构成的矩阵, 满足 $T^{-1} = T^T$, 则 $\sqrt{P} = T\Lambda^{\frac{1}{2}}T^T$, 这里 $\Lambda^{\frac{1}{2}} = \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \cdots, \sqrt{\lambda_n})$.

显然,C 确定后, 方程组 (5.3.56) 就可写成 (5.3.52) 式的形式, 然后用 CG 方法, 这实质就是已介绍过的 PCG 算法.

第二种方法是将 P 写成

$$P = HH^T \tag{5.3.58}$$

的形式, 其中 H 是一个非奇异矩阵, 这时等价的方程组为

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{f}$$

其中 $\tilde{A} = H^{-1}AH^{-T}$, $\tilde{\boldsymbol{f}} = H^{-1}\boldsymbol{f}$, $\tilde{\boldsymbol{x}} = H^T\boldsymbol{x}$. 易知矩阵 $\tilde{A}$ 关于通常的欧氏标量积是对称正定矩阵, 可以用 CG 迭代.

假定 A 对称正定, 下面考虑如何选择预条件子 P 使得 $P^{-1}A$ (或等价地说 $C^{-1}AC^{-1}$ 或 $H^{-1}AH^{-T}$) 有改善的条件数.

(1) 预条件子由 A 的对角矩阵给出

$$P = D = \mathrm{diag}(a_{11}, \cdots, a_{nn}) \tag{5.3.59}$$

这是 **Jacobi 预条件子**, 或由

$$P = D = \mathrm{diag}(c_1, \cdots, c_n) \tag{5.3.60}$$

给出, 其中 $c_i = (\sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}^2)^{\frac{1}{2}}$.

(2) **SSOR 预条件子**

$$P = (D + \omega L)D^{-1}(D + \omega L)^T, \quad 0 < \omega < 2 \tag{5.3.61}$$

这时矩阵 H 满足

$$P = HH^T, \quad H = (D + \omega L)(D^{\frac{1}{2}})^{-1} \tag{5.3.62}$$

其中 $D^{\frac{1}{2}} = \mathrm{diag}(\sqrt{a_{11}}, \cdots, \sqrt{a_{nn}})$.

(3) 若 $P = HH^T$, H 非奇异, 则计算 $H = (h_{ij})$ 最简单的方法是通过 A 的**不完全 Cholesky 分解**得到, 相应的算法如框图 5.1 所示. 显然,H 是一个下三角阵. 采用这种方法, P 与 A 保持相同的稀疏性, 但图 5.1 算法不总稳定.

(4) 通过 A 的不完全 LU 分解 (ILU) 得到. 当 A 是非对称矩阵, 特别当 A 是有带宽时, 常采用这种方法. 计算 A 的 LU 分解但去掉 L 或 U 中超出 A 的原结构之外的元素. ILU(p) 允许在 L 和 U 中有 p 个额外的对角线.

§5.4 Krylov 子空间迭代方法

我们前面介绍的 CG 方法就是一种典型的 Krylov 子空间迭代方法, 但 CG 算法要求系数矩阵 A 对称正定, 这在很多情况下并不满足, 本节讨论其他重要的 Krylov 子空间迭代算法, 使之适用于系数矩阵非对称或不正定的情况. 这些算法都不难推广到带预条件子的情况.

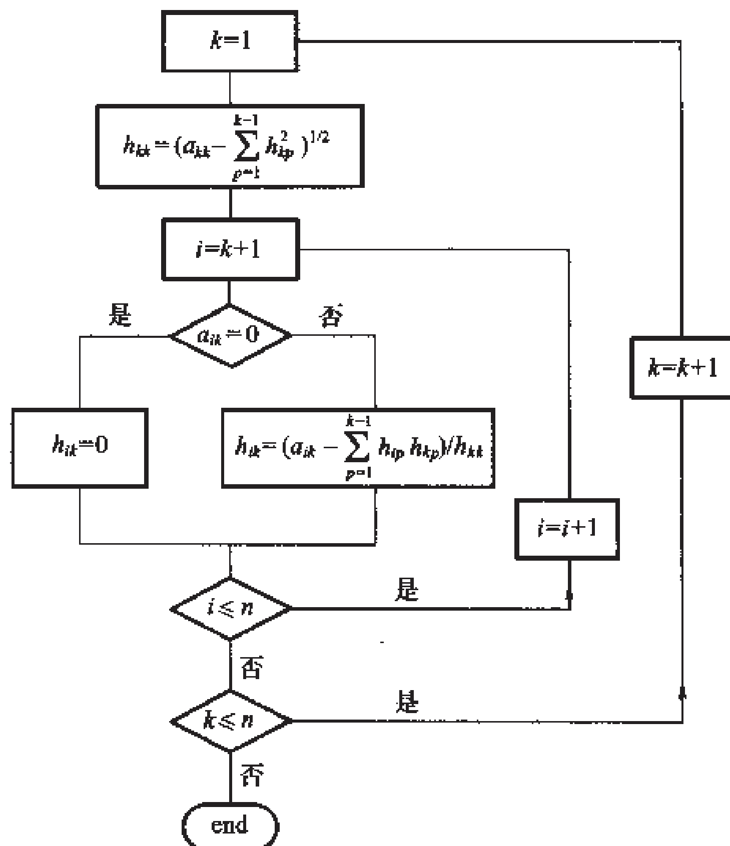


图 5.1 不完全 Cholesky 分解算法框图

§5.4.1 共轭梯度法方程残量 (CGNR) 法

任何非奇异方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$ 都可化为一个对称正定的方程组 (即法方程)

$$A^TA\boldsymbol{x}=A^T\boldsymbol{f} \tag{5.4.1}$$

然后对 (5.4.1) 式应用 CG 法, 这导致下面的**共轭梯度法方程残量 (CGNR) 法**.

令 $\boldsymbol{x}^0$ 给定, $\boldsymbol{r}^0=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}^0$, $\boldsymbol{p}^0=A^T\boldsymbol{r}^0$. 对每个 $k\geqslant 0$, 第 k 次迭代是

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{\|A^T\boldsymbol{r}^k\|_2^2}{\|A^T\boldsymbol{p}^k\|_2^2}\\
\boldsymbol{x}^{k+1} &= \boldsymbol{x}^k+\alpha_k\boldsymbol{p}^k\\
\boldsymbol{r}^{k+1} &= \boldsymbol{r}^k-\alpha_kA\boldsymbol{p}^k\\
\beta_{k+1} &= \frac{\|A^T\boldsymbol{r}^{k+1}\|_2^2}{\|A^T\boldsymbol{r}^k\|_2^2}\\
\boldsymbol{p}^{k+1} &= A^T\boldsymbol{r}^{k+1}+\beta_{k+1}\boldsymbol{p}^k
\end{aligned} \tag{5.4.2}$$

CGNR 法是极小化误差 $\|\boldsymbol{e}^k\|_{A^TA}=\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}\|_{A^TA}$. $\|\boldsymbol{e}^k\|_{A^TA}$ 是在仿射空间

$$\boldsymbol{x}_0+\mathrm{span}\{A^T\boldsymbol{r}^0,(A^TA)A^T\boldsymbol{r}^0,\ldots,(A^TA)^kA^T\boldsymbol{r}^0\}=\boldsymbol{x}_0+K_k(A^TA,\boldsymbol{r}^0)$$

上关于残量 $\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}^k$ 的 2 范数.

§5.4.2 共轭梯度法方程误差 (CGNE) 法

非对称方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$ 还可以化成如下的对称正定方程组

$$AA^T\boldsymbol{y}=\boldsymbol{f},\quad \boldsymbol{x}=A^T\boldsymbol{y}$$

对上式用 CG 算法, 就得到**共轭梯度法方程误差** (CGNE) **法**.

给定初值 $\boldsymbol{x}_0$, 计算 $\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}_0$, $\boldsymbol{p}_0=A^T\boldsymbol{r}_0$, 对 $k\geqslant 1$ 作如下计算

$$\begin{aligned}
&\alpha_{k-1}=\frac{\|\boldsymbol{r}^{k-1}\|_2^2}{\|\boldsymbol{p}^{k-1}\|_2^2}\\
&\boldsymbol{x}^k=\boldsymbol{x}^{k-1}+\alpha_{k-1}\boldsymbol{p}^{k-1}\\
&\boldsymbol{r}^k=\boldsymbol{r}^{k-1}-\alpha_{k-1}A\boldsymbol{p}^{k-1}\\
&\beta_{k-1}=\frac{\|\boldsymbol{r}^k\|_2^2}{\|\boldsymbol{r}^{k-1}\|_2^2}\\
&\boldsymbol{p}^k=A^T\boldsymbol{r}^k+\beta_{k-1}\boldsymbol{p}^k
\end{aligned}\tag{5.4.3}$$

CGNE 算法极小化误差 $\|\boldsymbol{e}^k\|_{A^TA}=\|\boldsymbol{y}^k-\boldsymbol{y}\|_{A^TA}$. $\|\boldsymbol{e}^k\|_{A^TA}$ 是在仿射空间

$$\boldsymbol{x}_k\in\boldsymbol{x}_0+\text{span}\{A^T\boldsymbol{r}^0,A^T(A^TA)\boldsymbol{r}^0,\ldots,A^T(A^TA)^k\boldsymbol{r}^0\}=\boldsymbol{x}_0+K_k(A^TA,A^T\boldsymbol{r}^0)$$

上的 $\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}\|_2$.

§5.4.3 广义共轭残量 (GCR) 法

当 A 对称正定时, CG 方法通过选择 A−共轭的方向来极小化 $\|\boldsymbol{e}^k\|_A$. 共轭残量法 CR 是 CG 的变异, 通过选择与 A^TA 正交的方向来极小化 $\|\boldsymbol{r}^k\|$. 这两种方法都有有限中止的性质.

对非对称方程组, **广义共轭残量** (GCR) **法**, 通过使方向与 A^TA 正交来构成一个新的向量. **广义共轭残量 (GCR) 算法** ($k_0=k+1$) 如下.

给定初始向量 $\boldsymbol{x}^0$, 计算 $\boldsymbol{r}^0=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}^0$, $\boldsymbol{p}^0=\boldsymbol{r}^0$, 于是第 k 次迭代 $(k\geqslant 0)$ 的格式为

$$\begin{aligned}
&\alpha_k=\frac{(\boldsymbol{r}^k,A\boldsymbol{p}^k)}{||A\boldsymbol{p}^k||_2^2}\\
&\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k+\alpha_k\boldsymbol{p}^k\\
&\boldsymbol{r}^{k+1}=\boldsymbol{r}^k-\alpha_kA\boldsymbol{p}^k\\
&\beta_j^k=-\frac{(||A\boldsymbol{r}^{k+1}||_2^2,A\boldsymbol{p}^j)}{||A\boldsymbol{p}^j||_2^2},\quad k-k_0+1\leqslant j\leqslant k\\
&\boldsymbol{p}^{k+1}=\boldsymbol{r}^{k+1}+\sum_{j=k-k_0+1}^{k}\beta_j^k\boldsymbol{p}^j\\
&A\boldsymbol{p}^{k+1}=A\boldsymbol{r}^{k+1}+\sum_{j=k-k_0+1}^{k}\beta_j^kA\boldsymbol{p}^j
\end{aligned}\tag{5.4.4}$$

§5.4.4 Orthodir 方法

Orthodir 方法由 Young 和 Jea(1980) 提出, 该方法这样形成一个新的方向: 通过将当前方向乘以 A 并与前面所有的方向 A^TA 正交. 对于正定的矩阵, Orthodir 方法在每步迭代上极小化 $\|r^k\|_2$. Orthodir 方法类似于 GCR 算法, 有如下**Orthodir(k_0) 算法**.

$$
\begin{aligned}
&\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^k, A\boldsymbol{p}^k)}{\|A\boldsymbol{p}^k\|_2^2}\\
&\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha_k \boldsymbol{p}^k\\
&\boldsymbol{r}^{k+1} = \boldsymbol{r}^k - \alpha_k \boldsymbol{p}^k\\
&\beta_j^k = -\frac{(A^2\boldsymbol{p}^k, A\boldsymbol{p}^j)}{\|A\boldsymbol{p}^j\|_2^2}, \quad k-k_0+1 \leqslant j \leqslant k\\
&\boldsymbol{p}^{k+1} = A\boldsymbol{p}^k + \sum_{j=k-k_0+1}^{k} \beta_j^k \boldsymbol{p}^j\\
&A\boldsymbol{p}^{k+1} = A^2\boldsymbol{p}^k + \sum_{j=k-k_0+1}^{k} \beta_j^k A\boldsymbol{p}^j
\end{aligned}
\tag{5.4.5}
$$

当 $k_0 = k+1$ 时, 即为 Orthodir 算法. 对非对称不定矩阵 Orthodir 算法保证收敛, Orthodir(k_0) 方法不能保证. 当 A 对称或者反对称时, Orthodir(2) 方法等价于 Orthodir 方法.

当 A 不正定时, GCR 会失效. 若 $0 \leqslant k_0 < k+1$, GCR 算法称为 **Orthomin(k_0) 方法**. 因此, Orthomin(k_0) 算法是截断的 GCR 方法. 在 Orthomin(k_0) 算法中, 每步的新方向与最新的 k_0 个方向 A^TA 正交.

§5.4.5 广义极小残量法 (GMRES) 迭代

广义极小残量法 (GMRES) 由 Saad 和 Schultz(1986) 导出.GMRES 迭代基于计算非对称矩阵特征值的 Arnoldi 方法. Arnoldi 方法给出了一种计算 Krylov 空间正交基的方法. 给定 $\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|_2}$, 计算 $A\boldsymbol{v}_1$, 并使 $A\boldsymbol{v}_1$ 与 $\boldsymbol{v}_1$ 正交, 再标准化, 记为 $\boldsymbol{v}_2$, 如此一直进行下去得到一个标准正交基 $\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_k$, 构成 $K_k(A, \boldsymbol{r}^0)$. 标准正交化最常用的是修正的 Gram-Schmidt 方法, Arnoldi **算法**如下:

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|_2}\\
&For \quad j = 1, 2, \cdots\\
&\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1} = A\boldsymbol{v}_j\\
&For \quad i = 1, \cdots, j\\
&h_{i,j} = (\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1}, \boldsymbol{v}_i)\\
&\boldsymbol{v}_{j+1} := \boldsymbol{v}_{j+1} - h_{i,j}\boldsymbol{v}_i
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&End\\
&h_{j+1,j} = \|\tilde{v}_{j+1}\|_2\\
&v_{j+1} = \frac{\tilde{v}_{j+1}}{h_{j+1,j}}\\
&End
\end{aligned}
\tag{5.4.6}
$$

设 $Q_{n,k}$ 是 $n \times k$ 矩阵, 矩阵的列向量由正交基向量 $q_1, q_2, \cdots, q_k$ 构成, 则 Arnoldi 算法可写成矩阵形式

$$
AQ_{n,k} = Q_{n,k}H_{k,k} + h_{k+1,k}q_{k+1}\xi_k^T = Q_{n,k+1}H_{k+1,k} \tag{5.4.7}
$$

其中 $H_{k,k}$ 是 $k \times k$ 上 Hessenberg 矩阵, 即

$$
H_{k,k} = \begin{bmatrix}
h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,k}\\
h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,k}\\
 & h_{3,2} & \cdots & h_{3,k}\\
 & & \ddots & \vdots\\
 & & h_{k,k-1} & h_{k,k}
\end{bmatrix}_{k\times k}
$$

ξ_k 是第 k 个分量为 1 的 k 维单位向量 $(0, \cdots, 0, 1)^T$. $H_{k+1,k}$ 是 $(k+1) \times k$ 矩阵, 其前 $k \times k$ 子块是 Hessenberg 矩阵 $H_{k,k}$, 最后一行除第 $k+1$ 行第 k 列元素 (记为 $h_{k+1,k}$) 外都为零. 在 GMRES 方法中, 近似解 x^k 取成

$$
x^k = x^0 + Q_{n,k}y_k \tag{5.4.8}
$$

的形式, 也即 x^k 是 x^0 加上一个 Krylov 空间的标准正交基向量的线性组合, 为了极小化 $\|r^k\|_2 = \|r^0 - AQ_{n,k}y_k\|_2$, y_k 必须满足

$$
\begin{aligned}
\|r^0 - AQ_{n,k}y_k\|_2 &= \min_y \|r^0 - AQ_{n,k}y\|_2 = \min_y \|r^0 - Q_{n,k+1}H_{k+1,k}y\|_2\\
&= \min_y \|Q_{n,k+1}(\beta\xi - H_{k+1,k}y)\|_2 = \min_y \|\beta\xi - H_{k+1,k}y\|_2
\end{aligned}
\tag{5.4.9}
$$

其中 $\beta = \|r^0\|_2$, ξ 是 $k+1$ 维向量 $(1, 0, \cdots, 0)^T$, 注意在简化中利用了关系式 $Q_{n,k+1}\xi = \dfrac{r^0}{\beta} = \dfrac{r^0}{\|r^0\|_2}$. 式 (5.4.9) 是一个最小二乘问题, 我们用 QR 因子分解来求解, 即将 $(k+1) \times k$ 矩阵 $H_{k+1,k}$ 分解成一个 $(k+1) \times (k+1)$ 正交矩阵 $Q_{k+1,k+1}$ 和一个 $(k+1) \times k$ 上三对角 $R_{k+1,k}$ 的乘积, 即

$$
H_{k+1,k} = Q_{k+1,k+1}R_{k+1,k} = Q_{k+1,k+1}\begin{bmatrix} R_{k,k}\\ 0 \end{bmatrix} \tag{5.4.10}
$$

其中 $R_{k,k}$ 是 $R_{k+1,k}$ 的 $k\times k$ 三对角块子矩阵. 具体实施是用 Givens 旋转, 消除上 Hessenberg 矩阵 $H_{k+1,k}$ 中次对角线以下的元素, 可表示为

$$(G_kG_{k-1}\cdots G_2G_1)H_{k+1,k}=R_{k+1,k}=\begin{bmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & * \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}_{(k+1)\times k}=\begin{pmatrix} R_{k,k} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.4.11}$$

其中 $*$ 表示非零元素, G_i 表示第 i 次 Givens 旋转

$$G_i=\begin{bmatrix} I & & & \\ & c_i & s_i & \\ & -s_i & c_i & \\ & & & I \end{bmatrix},\quad c_i=\cos\theta_i,\quad s_i=\sin\theta_i \tag{5.4.12}$$

其中两个 c_i 分别位于 (i,i) 和 $(i+1,i+1)$ 的位置. 该 G_i 将 $H_{k+1,k}$ 的第 $i+1$ 行第 i 列的元素 $h_{i+1,i}$ 变为零. 使用 (5.4.11) 式和 (5.4.12) 式进行分解的优点是很容易得到下一个矩阵 $H_{k+2,k+1}$ 的 QR 分解. 首先注意到

$$(G_kG_{k-1}\cdots G_1)H_{k+2,k+1}=\begin{bmatrix} * & * & \cdots & * & * \\ 0 & * & \cdots & * & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & * & * \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{k+1,k+1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{k+2,k+1} \end{bmatrix}_{(k+2)\times(k+1)} \tag{5.4.13}$$

若这样选择第 $k+1$ 次 Givens 旋转 G_{k+1}:

当 $h_{k+1,k+1}\neq 0$ 时

$$c_{k+1}=\frac{h_{k+1,k+1}}{\sqrt{h_{k+1,k+1}^2+h_{k+2,k+1}^2}},\qquad s_{k+1}=\frac{h_{k+2,k+1}}{\sqrt{h_{k+1,k+1}^2+h_{k+2,k+1}^2}} \tag{5.4.14}$$

$$G_{k+1}=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & c_{k+1} & s_{k+1} \\ & & & -s_{k+1} & c_{k+1} \end{bmatrix}_{(k+2)\times(k+2)} \tag{5.4.15}$$

当 $h_{k+1,k+1}=0$ 时 $\quad c_{k+1}=0,\ s_{k+1}=1.$

则可以验证 G_{k+1} 左乘 (5.4.13) 时, 右端结果第 $(k+1,k+1)$ 元素为 $\sqrt{h_{k+1,k+1}^2+h_{k+2,k+1}^2}$ 恒不为零, 第 $(k+2,k+1)$ 元素为零, 即完成了 $H_{k+2,k+1}$ 元素的 QR 分解.

在完成 $H_{k+1,k}$ 的 QR 分解后, 极小化问题 (5.4.9) 的解即等价于求解下面的上三角矩阵方程

$$R_{k,k}\boldsymbol{y}=\beta[G\boldsymbol{\xi}]_{k\times 1}$$

其中 G 是 $k+1$ 阶矩阵为 $(G_kG_{k-1}\cdots G_1)^{-1}$, $[G\boldsymbol{\xi}]$ 表示取 $G\boldsymbol{\xi}$ 的前 k 个元素. 于是解为

$$\boldsymbol{y}_k=R_{k,k}^{-1}\beta[G\boldsymbol{\xi}]_{k\times 1}$$

从而由 (5.4.8) 式解得 $\boldsymbol{x}^k$ 为

$$\boldsymbol{x}^k=\boldsymbol{x}^0+Q_{n,k}\boldsymbol{y}_k=\boldsymbol{x}^0+\beta Q_{n,k}R_{k,k}^{-1}[G\boldsymbol{\xi}]_{k\times 1}$$

由以上分析, 可得下面的 **GMRES 算法**:

1. 初始化. 给定 $\boldsymbol{x}^0$, 计算 $\boldsymbol{r}^0=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}^0,\ \boldsymbol{q}_1=\frac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|_2},\ \boldsymbol{\xi}=(1,0,\cdots,0)^T,\ \beta=\|\boldsymbol{r}^0\|$. 对 $k\geqslant 1$, 执行下面步骤.

2. 用 Arnoldi 算法计算 $\boldsymbol{q}_{k+1}$ 和 $h_{i,k}(i=1,\cdots,k+1)$. 将 $G_1,\cdots,G_{k-1}$ 作用于 $H_{i+1,i}$ 的最后一列, 也即有 (仅写出变化的元素)

$$\begin{bmatrix} h_{i,k}\\ h_{i+1,k}\end{bmatrix}:=\begin{bmatrix} c_i & s_i\\ -s_i & c_i\end{bmatrix}\begin{bmatrix} h_{i,k}\\ h_{i+1,k}\end{bmatrix},\quad i=1,\cdots,k-1$$

3. 计算第 k 次 Givens 旋转的 c_k 和 s_k

$$c_k=\frac{h_{k,k}^2}{h_{k,k}^2+h_{k+1,k}^2},\qquad s_k=\frac{c_kh_{k+1,k}}{h_{k,k}}$$

4. 对 $k+1$ 维向量 $\boldsymbol{\xi}$ 的最后两元素和 $H_{k+1,k}$ 的最后一列分别作用第 k 次 Givens 变换 G_k, 有

$$\begin{bmatrix} \xi_k\\ \xi_{k+1}\end{bmatrix}:=\begin{bmatrix} c_k & s_k\\ -s_k & c_k\end{bmatrix}\begin{bmatrix} \xi_k\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} c_k\boldsymbol{\xi}_k\\ -s_k\boldsymbol{\xi}_k\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} h_{k,k}\\ h_{k+1,k}\end{bmatrix}:=\begin{bmatrix} c_k & s_k\\ -s_k & c_k\end{bmatrix}\begin{bmatrix} h_{k,k}\\ h_{k+1,k}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} c_kh_{k,k}+s_kh_{k+1,k}\\ 0\end{bmatrix}$$

5. 求解关于 $\boldsymbol{y}_k$ 的上三角方程组 $H_{k,k}\boldsymbol{y}_k=[\beta\boldsymbol{\xi}]_{k\times 1}$.

6. 计算解 $\boldsymbol{x}^k=\boldsymbol{x}^0+Q_{n,k}\boldsymbol{y}_k$

上面的算法称为**全 GMRES 算法**. 当迭代次数 k 增加时 (k 也是 Krylov 子空间的维数), 需要存储的向量数也增加, 为了弥补这个缺陷, 可以用 **GMRES($\boldsymbol{k}_0$) 算法**,

也即在每第 k_0 步重新开始 GMRES 算法, 开始的初值取为最后一次的迭代值, 以带预条件子 P 的形式表示如下:

1. 选择 $\boldsymbol{x}^0$, 计算 $\boldsymbol{r}^0 = P^{-1}(\boldsymbol{f} - A\boldsymbol{x}^0)$, $\boldsymbol{q}_1 = \dfrac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|_2}$, $\beta = \|\boldsymbol{r}^0\|$. 取 $k+1$ 维向量 $\boldsymbol{\xi} = (1, 0, \cdots, 0)^T$. 对 $1 \leqslant k \leqslant k_0$, 执行下面步骤.

2. 用 Arnoldi 算法计算 $\boldsymbol{q}_{k+1}$ 和 $h_{i,k}(i = 1, \cdots, k+1)$. 从而给出 $(k_0+1) \times k_0$ 阶上三角 Hessenberg 矩阵.

3. 计算解 $\boldsymbol{x}^{k_0} = \boldsymbol{x}^0 + Q_{n,k_0}\boldsymbol{y}_{k_0}$, 其中 $\boldsymbol{y}_{k_0}$ 极小化 $\|\beta\boldsymbol{\xi} - H_{k_0,k_0}\boldsymbol{y}\|_2$.

4. 计算 $\boldsymbol{r}^{k_0} = \boldsymbol{f} - A\boldsymbol{x}^{k_0}$, 若满足条件, 则停止, 否则令 $\boldsymbol{x}^0$ 等于 $\boldsymbol{x}^{k_0}$. 返回 (1) 重新计算.

对非奇异矩阵, GMRES 数学上等价于 Orthodir 方法, 因此, 它不会失效, 尽管收敛很慢甚至停滞不前; 对正定矩阵, 它等价于 GCR. GMRES(k_0) 数学上等价于 Orthodir(k_0), 因此, 对非对称和不定矩阵, 收敛性不保证.

§5.4.6 极小残量 (MINRES) 法

当 A 对称时, Arnoldi 算法简化成 Lanczos 算法. Lanczos 算法如下.

Lanczos 算法

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|_2}, \quad \beta_0 = 0 \\
&\text{For} \quad k = 1, 2, \cdots \\
&\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} = A\boldsymbol{v}_k - \beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1} \\
&\alpha_k = (\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}, \boldsymbol{v}_k) \\
&\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} := \widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} - \alpha_k\boldsymbol{v}_k \\
&\beta_k = \|\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}\|_2 \\
&\boldsymbol{v}_{k+1} = \frac{\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}}{\beta_k} \\
&\text{End}
\end{aligned}
\tag{5.4.16}
$$

定理 5.4.1 由 Lanczos 算法产生的向量 $\boldsymbol{v}_k$ 有

$$
\operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_k\} = \operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_1, A\boldsymbol{v}_1, \cdots, A^k\boldsymbol{v}_1\} \tag{5.4.17}
$$

证明 首先用数学归纳法证明 $\{\boldsymbol{v}_k\}$ 构成一组标准正交基. 由 Lanczos 算法知,

$$
\|\boldsymbol{v}_i\|_2 = \frac{\|\widetilde{\boldsymbol{v}}_i\|_2}{\beta_{i-1}} = 1
$$

显然成立.

当 $k = 1$ 时, 由 $\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} = A\boldsymbol{v}_k - \beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1} - \alpha_k\boldsymbol{v}_k$ 知

$$
\widetilde{\boldsymbol{v}}_2 = A\boldsymbol{v}_1 - \beta_0\boldsymbol{v}_0 - \alpha_1\boldsymbol{v}_1 = A\boldsymbol{v}_1 - (\widetilde{\boldsymbol{v}}_2, \boldsymbol{v}_1)\boldsymbol{v}_1
$$

所以

$$(\boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_1) = \frac{1}{\beta_1}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_2, \boldsymbol{v}_1) = \frac{1}{\beta_1}(A\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_1) - \frac{1}{\beta_1}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_2, \boldsymbol{v}_1)$$

又由 $A\boldsymbol{v}_k = \widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} + \beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1}$ 知, $A\boldsymbol{v}_1 = \widetilde{\boldsymbol{v}}_2 + \beta_0\boldsymbol{v}_0 = \widetilde{\boldsymbol{v}}_2$, 因此, $(\boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_1) = 0$ 成立.

假设 $(\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j) = 0\ (1 \leqslant i, j \leqslant k)$ 成立. 下证对 $1 \leqslant i, j \leqslant k+1$ 情形也成立. 注意利用归纳假设有

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{v}_{k+1}, \boldsymbol{v}_k) &= \frac{1}{\beta_k}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}, \boldsymbol{v}_k) = \frac{1}{\beta_k}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} - \alpha_k\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_k) \\
&= \frac{1}{\beta_k}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}, \boldsymbol{v}_k) - \frac{\alpha_k}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_k) \\
&= \frac{1}{\beta_k}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}, \boldsymbol{v}_k) - \frac{1}{\beta_k}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}, \boldsymbol{v}_k) = 0
\end{aligned} \tag{5.4.18}$$

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{v}_{k+1}, \boldsymbol{v}_{k-1}) &= \frac{1}{\beta_k}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}, \boldsymbol{v}_{k-1}) \\
&= \frac{1}{\beta_k}(A\boldsymbol{v}_k - \alpha_k\boldsymbol{v}_k - \beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1}, \boldsymbol{v}_{k-1}) \\
&= \frac{1}{\beta_k}(A\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_{k-1}) - \frac{\beta_{k-1}}{\beta_k} \\
&= \frac{1}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, A\boldsymbol{v}_{k-1}) - \frac{\beta_{k-1}}{\beta_k} = \frac{1}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, \widetilde{\boldsymbol{v}}_k + \beta_{k-2}\boldsymbol{v}_{k-2}) - \frac{\beta_{k-1}}{\beta_k} \\
&= \frac{1}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, \widetilde{\boldsymbol{v}}_k) - \frac{\beta_{k-1}}{\beta_k} = \frac{\beta_{k-1}}{\beta_k}(\widetilde{\boldsymbol{v}}_k, \widetilde{\boldsymbol{v}}_k) - \frac{\beta_{k-1}}{\beta_k} = 0
\end{aligned} \tag{5.4.19}$$

当 $1 \leqslant j < k-1$ 时

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{v}_{k+1}, \boldsymbol{v}_j) &= \frac{1}{\beta_k}(A\boldsymbol{v}_k - \beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1} - \alpha_k\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_j) \\
&= \frac{1}{\beta_k}(A\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_j) = \frac{1}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, A\boldsymbol{v}_j) \\
&= \frac{1}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, \widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1} + \beta_{j-1}\boldsymbol{v}_{j-1}) \\
&= \frac{1}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, \widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1}) = \frac{\beta_j}{\beta_k}(\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_{j+1}) = 0
\end{aligned} \tag{5.4.20}$$

由 (5.4.18)~(5.4.20) 式知, $(\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j) = 0\ (1 \leqslant i, j \leqslant k+1)$, 归纳法得证. 因此 $\{\boldsymbol{v}_k\}$ 确实是一组标准正交基向量.

其次, 证明

$$\operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_k\} = \operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_1, A\boldsymbol{v}_1, \cdots, A^k\boldsymbol{v}_1\} \tag{5.4.21}$$

仍用归纳法证明. 显然, 当 $k=1$ 时, $A\boldsymbol{v}_1 = \widetilde{\boldsymbol{v}}_2 + \beta_0\boldsymbol{v}_0 = \beta_1\boldsymbol{v}_2$, 从而 $\operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2\} = \operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_1, A\boldsymbol{v}_1\}$ 成立. 假设 (5.4.21) 式成立. 下面证明对 $k+1$ 的情形该式也成立.

由归纳假设知

$$v_k \in \text{span}\{v_1, Av_1, \cdots, A^k v_1\}$$

从而

$$Av_k \in \text{span}\{Av_1, A^2 v_1, \cdots, A^{k+1} v_1\}$$

又

$$v_{k+1} = \frac{\widetilde{v}_{k+1}}{\beta_k} = \frac{1}{\beta_k}(Av_k - \beta_{k-1} v_{k-1} - \alpha_k v_k)$$

所以

$$\begin{aligned} & v_{k+1} \in \text{span}\{v_1, A^k v_1, \cdots, A^{k+1} v_1\} \\ & \text{span}\{v_1, v_2, \cdots, v_k\} \subseteq \text{span}\{v_1, Av_1, \cdots, A^k v_1\} \end{aligned} \tag{5.4.22}$$

另一方面, 由归纳假设知

$$A^k v_1 \in \text{span}\{v_1, v_2, \cdots, v_k\}$$

所以

$$A^{k+1} v_1 \in \text{span}\{Av_1, Av_2, \cdots, Av_k\}$$

又由

$$Av_k = \widetilde{v}_{k+1} + \alpha_k v_k + \beta_{k-1} v_{k-1} = \beta_k v_{k+1} + \alpha_k v_k + \beta_{k-1} v_{k-1}$$

知

$$A^{k+1} v_1 \in \text{span}\{v_1, v_2, \cdots, v_{k+1}\}$$

故

$$\text{span}\{v_1, Av_1, \cdots, A^{k+1} v_1\} \subseteq \text{span}\{v_1, v_2, \cdots, v_{k+1}\} \tag{5.4.23}$$

所以由 (5.4.22) 式和 (5.4.23) 式知, (5.4.21) 式对 $k+1$ 也成立.

因此 $\{v_k\}$ 构成 Krylov 子空间的标准正交基.

□

Lanczos 算法可改写成矩阵形式

$$AQ_{n,k} = Q_{n,k} T_{k,k} + \beta_k q_{k+1} \xi_k^T = Q_{n,k+1} T_{k+1,k}$$

其中$Q_{n,k}$ 是 $n \times k$ 矩阵, 矩阵的列由正交基向量 $q_1, \cdots, q_k$ 构成, ξ_k 是 k 维单位向量$\xi_k = (0, \cdots, 1)^T$, $T_{k,k}$ 是 $k \times k$ 阶三对角矩阵

$$T_{k,k} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k & \beta_{k-1} \end{bmatrix}_{k \times k}$$

$T_{k+1,k}$ 是 $(k+1)\times k$ 阶矩阵, 且以 $T_{k,k}$ 为上 $k\times k$ 阶子矩阵, 最后一行除第 k 列元素为 $\beta_k\boldsymbol{\xi}_k^T$ 外均为零, 即 $T_{k+1,k}$ 可写成

$$T_{k+1,k}=\begin{bmatrix} T_{k,k}\\ \beta_k\boldsymbol{\xi}_k^T\end{bmatrix}_{(k+1)\times k}$$

极小残量 (MINRES) 法是在仿射空间 $\text{span}\{\boldsymbol{q}_1,A\boldsymbol{q}_1,\cdots,A^k\boldsymbol{q}_1\}$ 上极小化残量. 解的形式取成

$$\boldsymbol{x}^k=\boldsymbol{x}^0+Q_{n,k}\boldsymbol{y}_k$$

其中 $\boldsymbol{y}_k$ 是下列最小二乘问题的解

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{r}^0-AQ_{n,k}\boldsymbol{y}_k\|_2&=\min_{\boldsymbol{y}}\|\boldsymbol{r}^0-AQ_{n,k}\boldsymbol{y}\|_2=\min_{\boldsymbol{y}}\|\mathbf{r}^0-AQ_{n,k+1}T_{k+1,k}\boldsymbol{y}\|_2\\&=\min_{\boldsymbol{y}}\|Q_{n,k+1}(\beta\boldsymbol{\xi}-T_{k+1,k}\boldsymbol{y})\|_2\\&=\min_{\boldsymbol{y}}\|\beta\boldsymbol{\xi}-T_{k+1,k}\boldsymbol{y}\|_2\end{aligned}\tag{5.4.24}$$

其中 $\boldsymbol{\xi}=(1,\cdots,0)^T$ 是 $k+1$ 维单位向量. 同 GMRES 中算法一样, 我们通过对矩阵 $T_{k+1,k}$ 作 QR 分解来求解该最小二乘问题 (后面将详细讨论), 即

$$G_{k+1,k+1}T_{k+1,k}=R_{k+1,k}=\begin{bmatrix}R_{k,k}\\0\end{bmatrix}$$

其中$G_{k+1,k+1}$ 是 $k+1$ 阶正交矩阵, 由一系列 Givens 旋转矩阵确定. $R_{k+1,k}$ 是 $(k+1)\times k$ 阶矩阵.

由于 $T_{k+1,k}$ 是三对角矩阵, 所以 $R_{k,k}$ 仅有三条非零对角线, 于是问题 (5.2.4) 的解 $\boldsymbol{y}_k$ 可表示为

$$\boldsymbol{y}_k=R_{k,k}^{-1}\beta[G\boldsymbol{\xi}]_{k\times1}$$

从而

$$\boldsymbol{x}^k=\boldsymbol{x}^0+Q_{n,k}\boldsymbol{y}_k=\boldsymbol{x}^0+\beta Q_{n,k}R_{k,k}^{-1}[G\boldsymbol{\xi}]_{k\times1}\tag{5.4.25}$$

这里 $[G\boldsymbol{\xi}]_{k\times1}$ 表示取其前 k 个元素. 若记 $P_{n,k}\equiv(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_{k-1})\equiv Q_{n,k}R_{k,k}^{-1}$, 即 $P_{n,k}R_{k,k}=Q_{n,k}$, 则 (5.4.25) 可写成递推形式

$$\boldsymbol{x}^k=\boldsymbol{x}^{k-1}+a_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}$$

其中 a_{k-1} 是 $[\beta G\boldsymbol{\xi}]_{k\times1}$ 的第 k 个元素. 由上分析可得如下 **MINRES 算法**(A 对称):

1. 选择 $\boldsymbol{x}^0$, 计算 $\boldsymbol{r}^0=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{x}$, 令 $\boldsymbol{q}_1=\dfrac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|}$, $k+1$ 维向量 $\boldsymbol{\xi}=(1,\cdots,0)^T$, $\beta=\|\boldsymbol{r}^0\|$. 对 $k=1,2,\cdots$ 作如下计算

2. 用 Lanczos 算法计算 $\boldsymbol{q}_{k+1}$, $\alpha_k\equiv t_{k,k}$, $\beta_k=t_{k+1,k}=t_{k,k+1}$, 从而形成三对角矩阵 $T_{k+1,k}$.

3. 将 Givens 旋转 G_i 作用于矩阵 $T_{i+1,i}(i=1,\cdots,k-1)$ 的最后一列

$$\begin{bmatrix} t_{i,k} \\ t_{i+1,k} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} c_i & s_i \\ -s_i & c_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{i,k} \\ t_{i+1,k} \end{bmatrix}, \quad i=1,\cdots,k-1$$

4. 计算第 k 次 Givens 旋转的 c_k 和 s_k

$$c_k = \frac{t_{k,k}^2}{t_{k,k}^2 + t_{k+1,k}^2}, \quad s_k = \frac{c_k t_{k+1,k}}{t_{k,k}}$$

5. 对 $k+1$ 维向量 $\boldsymbol{\xi}$ 和 $T_{k+1,k}$ 的最后一列分别作用第 k 次 Givens 变换 G_k, 有

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}_k \\ \boldsymbol{\xi}_{k+1} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} c_k & s_k \\ -s_k & c_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}_k \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_k\boldsymbol{\xi}_k \\ -s_k\boldsymbol{\xi}_k \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} t_{k,k} \\ t_{k+1,k} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} c_k & s_k \\ -s_k & c_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{k,k} \\ t_{k+1,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_k t_{k,k} + s_k t_{k+1,k} \\ 0 \end{bmatrix}$$

6. 计算解

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^k &= \boldsymbol{x}^0 + Q_{n,k} R_{k,k}^{-1} \beta [G\boldsymbol{\xi}]_{k\times 1} \\ &= \boldsymbol{x}^{k-1} + a_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1} \end{aligned}$$

§5.4.7 双共轭梯度 (Bi-CG) 法

当 A 非对称时, 构造 Krylov 子空间的递推方法不能简化为一个三项递推形式, 但同一对三项递推形式, 可以构造相应于 A 和 A^T 的 Krylov 空间的双正交基, 即若 $\boldsymbol{v}_i \in K_k(A,\boldsymbol{v}^0)$, $\boldsymbol{w}_j \in K_k(A^T,\tilde{\boldsymbol{r}}^0)$, 则 $(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{w}_j)=0$ $(i\neq j)$. 构造双正交基用双正交 Lanczos 算法来实现. **双正交 Lanczons 算法**如下:

选择 $\boldsymbol{r}^0$ 和 $\tilde{\boldsymbol{r}}^0$, $(\boldsymbol{r}^0,\tilde{\boldsymbol{r}}^0)\neq 0$, 计算

$$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|_2}, \qquad \boldsymbol{w}_1 = \frac{\tilde{\boldsymbol{r}}^0}{(\tilde{\boldsymbol{r}}^0,\boldsymbol{v}_1)}$$

令 $\beta_0=\gamma_0=0$, $\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{w}_0=0$, 对 $k=1,2,\cdots$ 执行下面步骤:

$$\begin{aligned} &\alpha_k = (A\boldsymbol{v}_k,\boldsymbol{w}_k) \\ &\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} = A\boldsymbol{v}_k - \alpha_k\boldsymbol{v}_k - \beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1} \\ &\tilde{\boldsymbol{w}}_{k+1} = A^T\boldsymbol{w}_k - \alpha_k\boldsymbol{w}_k - \gamma_{k-1}\boldsymbol{w}_{k-1} \\ &\gamma_k = \|\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}\|_2, \qquad \boldsymbol{v}_{k+1} = \frac{\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}}{\gamma_{k+1}} \\ &\beta_k = (\boldsymbol{v}_{k+1},\boldsymbol{w}_{k+1}), \qquad \boldsymbol{w}_{k+1} = \frac{\tilde{\boldsymbol{w}}_{k+1}}{\beta_k} \end{aligned} \tag{5.4.26}$$

定理 5.4.2 若 $(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{w}_i)\neq 0$ $(1\leqslant i\leqslant k+1)$, 则

$$(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{w}_i)=0, \quad \forall i\neq j,\ 1\leqslant i,j\leqslant k+1 \tag{5.4.27}$$

证明 用数学归纳法证明.

首先证明当 $k=1$ 时 (5.4.27) 式成立. 注意由 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{w}_1$ 的初始值可知 $(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{w}_1)=1$. 于是

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{w}_2)&=(\boldsymbol{v}_1,\frac{\boldsymbol{w}_2}{\beta_1})=\frac{1}{\beta_1}(\boldsymbol{v}_1,A^T\boldsymbol{w}_1-\alpha_1\boldsymbol{w}_1-\gamma_0\boldsymbol{w}_0)=\frac{1}{\beta_1}(\boldsymbol{v}_1,A^T\boldsymbol{w}_1-\alpha_1\boldsymbol{w}_1)\\&=\frac{1}{\beta_1}(\boldsymbol{v}_1,A^T\boldsymbol{w}_1)-\frac{\alpha_1}{\beta_1}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{w}_1)=\frac{\alpha_1}{\beta_1}-\frac{\alpha_1}{\beta_1}=0\end{aligned}$$

及

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{w}_1)&=\frac{1}{\gamma_1}(\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{w}_1)=\frac{1}{\gamma_1}(A\boldsymbol{v}_1-\alpha_1\boldsymbol{v}_1-\beta_0\boldsymbol{v}_0,\boldsymbol{w}_1)\\&=\frac{1}{\gamma_1}(A\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{w}_1)-\frac{\alpha_1}{\gamma_1}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{w}_1)=\frac{\alpha_1}{\gamma_1}-\frac{\alpha_1}{\gamma_1}=0.\end{aligned}$$

因此当 $k=1$ 时 (5.4.27) 式成立. 现假设 (5.4.27) 式当 $1\leqslant i,j\leqslant k$ 时成立. 注意对所有 $2\leqslant i\leqslant k$, 有

$$\|\boldsymbol{v}_i\|_2=\frac{\|\tilde{\boldsymbol{v}}_i\|_2}{\gamma_{i-1}}=\frac{\|\tilde{\boldsymbol{v}}_2\|}{\|\tilde{\boldsymbol{v}}_i\|_2}=1,(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{w}_i)=(\frac{\tilde{\boldsymbol{v}}_i}{\gamma_{i-1}},\frac{\tilde{\boldsymbol{w}}_i}{\beta_{i-1}})=\frac{1}{\gamma_{i-1}}(\boldsymbol{v}_i,\frac{\gamma_{i-1}\tilde{\boldsymbol{w}}_i}{(\tilde{\boldsymbol{v}}_i,\boldsymbol{w}_i)})=1.$$

当 $i=1$ 时, 显然也有 $\|\boldsymbol{v}_1\|_2=1$, $(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{w}_1)=1$. 于是

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{v}_{k+1},\boldsymbol{w}_k)&=\gamma_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1},\boldsymbol{w}_k)=\gamma_k^{-1}(A\boldsymbol{v}_k-\alpha_k\boldsymbol{v}_k-\beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1},\boldsymbol{w}_k)\\&=\gamma_k^{-1}(A\boldsymbol{v}_k,\boldsymbol{w}_k)-\alpha_k\gamma_k^{-1}(\boldsymbol{v}_k,\boldsymbol{w}_k)\\&=\alpha_k\gamma_k^{-1}-\alpha_k\gamma_k^{-1}=0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{w}_{k+1},\boldsymbol{v}_k)&=\beta_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{w}}_k,\boldsymbol{v}_k)=\beta_k^{-1}(A^T\boldsymbol{w}_k-\alpha_k\boldsymbol{w}_k-\gamma_{k-1}\boldsymbol{w}_{k-1},\boldsymbol{v}_k)\\&=\beta_k^{-1}(A^T\boldsymbol{w}_k,\boldsymbol{v}_k)-\alpha_k\beta_k^{-1}(\boldsymbol{w}_k,\boldsymbol{v}_k)\\&=\beta_k^{-1}\alpha_k-\alpha_k\beta_k^{-1}=0\end{aligned}$$

$$\vdots$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{v}_{k+1},\boldsymbol{w}_{k-1})&=\gamma_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1},\boldsymbol{w}_{k-1})=\gamma_k^{-1}(A\boldsymbol{v}_k-\alpha_k\boldsymbol{v}_k-\beta_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1},\boldsymbol{w}_{k-1})\\&=\gamma_k^{-1}(A\boldsymbol{v}_k,\boldsymbol{w}_{k-1})-\gamma_k^{-1}\beta_{k-1}(\boldsymbol{v}_{k-1},\boldsymbol{w}_{k-1})\\&=\gamma_k^{-1}(\boldsymbol{v}_k,A^T\boldsymbol{w}_{k-1})-\gamma_k^{-1}\beta_{k-1}\\&=\gamma_k^{-1}(\boldsymbol{v}_k,\tilde{\boldsymbol{w}}_k+\alpha_{k-1}\boldsymbol{w}_{k-1}+\gamma_{k-2}\boldsymbol{w}_{k-2})-\gamma_k^{-1}\beta_{k-1}\\&=\gamma_k^{-1}(\boldsymbol{v}_k,\tilde{\boldsymbol{w}}_k)-\gamma_k^{-1}\beta_{k-1}\\&=\gamma_k^{-1}\beta_{k-1}-\gamma_k^{-1}\beta_{k-1}=0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{w}_{k+1},\boldsymbol{v}_{k-1}) &= \beta_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{w}}_k,\boldsymbol{v}_{k-1}) = \beta_k^{-1}(A^T\boldsymbol{w}_k - \alpha_k\boldsymbol{w}_k - \gamma_{k-1}\boldsymbol{w}_{k-1},\boldsymbol{v}_{k-1})\\ &= \beta_k^{-1}(A^T\boldsymbol{w}_k,\boldsymbol{v}_{k-1}) - \beta_k^{-1}\gamma_{k-1}\\ &= \beta_k^{-1}(\boldsymbol{w}_k, A\boldsymbol{v}_{k-1}) - \beta_k^{-1}\gamma_{k-1}\\ &= \beta_k^{-1}(\boldsymbol{w}_k,\tilde{\boldsymbol{v}}_k + \alpha_{k-1}\boldsymbol{v}_{k-1} + \beta_{k-2}\boldsymbol{v}_{k-2}) - \beta_k^{-1}\gamma_{k-1}\\ &= \beta_k^{-1}(\boldsymbol{w}_k,\tilde{\boldsymbol{v}}_k) - \beta_k^{-1}\gamma_{k-1} = \beta_k^{-1}\gamma_{k-1} - \beta_k^{-1}\gamma_{k-1} = 0\end{aligned}$$

当 $1 \leqslant i < k-1$ 时, 注意利用归纳假设 $(i+1<k)$, 有

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{v}_{k+1},\boldsymbol{w}_i) &= \gamma_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1},\boldsymbol{w}_i) = \gamma_k^{-1}(A\tilde{\boldsymbol{v}}_k,\boldsymbol{w}_i) = \gamma_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{v}}_k, A^T\boldsymbol{w}_i)\\ &= \gamma_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{v}}_k,\tilde{\boldsymbol{w}}_{i+1} + \alpha_i\boldsymbol{w}_i + \gamma_{i-1}\boldsymbol{w}_{i-1}) = 0.\\ (\boldsymbol{w}_{k+1},\boldsymbol{v}_i) &= \beta_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{w}}_{k+1},\boldsymbol{v}_i) = \beta_k^{-1}(A^T\tilde{\boldsymbol{w}}_k,\boldsymbol{v}_i) = \beta_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{w}}_k, A\boldsymbol{v}_i)\\ &= \beta_k^{-1}(\tilde{\boldsymbol{w}}_k,\tilde{\boldsymbol{v}}_{i+1} + \alpha_i\boldsymbol{v}_i + \beta_{i-1}\boldsymbol{v}_{i-1}) = 0\end{aligned}$$

另外, 由算法可知

$$\|\boldsymbol{v}_{k+1}\|_2 = \frac{\|\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}\|_2}{\gamma_k} = 1$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{v}_{k+1},\boldsymbol{w}_{k+1}) &= \left(\frac{\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}}{\gamma_k},\frac{\widetilde{\boldsymbol{w}}_{k+1}}{\beta_k}\right) = \frac{1}{\gamma_k}\left(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1},\frac{\widetilde{\boldsymbol{w}}_{k+1}}{(\boldsymbol{v}_{k+1},\widetilde{\boldsymbol{w}}_{k+1})}\right)\\ &= \frac{1}{\gamma_k}\left(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k-1},\frac{\gamma_k\widetilde{\boldsymbol{w}}_{k+1}}{(\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1},\widetilde{\boldsymbol{w}}_{k+1})}\right) = 1\end{aligned}$$

由此可知, (5.4.27) 式对 $k+1$ 情况也成立. 因此由归纳法知定理得证.

□

双正交 Lanczos 算法可用矩阵的形式表示为

$$AV_{n,k} = V_{n,k}T_{k,k} + \gamma_k\boldsymbol{v}_{k+1}\boldsymbol{\xi}_k^T = V_{n,k+1}T_{k+1,k}, \tag{5.4.28}$$

$$A^TW_{n,k} = W_{n,k}T_{k,k}^T + \beta_k\boldsymbol{w}_{k+1}\boldsymbol{\xi}_k^T = W_{n,k+1}\tilde{T}_{k+1,k}, \tag{5.4.29}$$

其中 $V_{n,k}$ 是以标准正交基向量 $\boldsymbol{v}_1,\cdots,\boldsymbol{v}_k$ 为列构成的 $n\times k$ 矩阵, $W_{n,k}$ 是以标准正交基向量 $\boldsymbol{w}_1,\cdots,\boldsymbol{w}_k$ 为列构成的 $n\times k$ 矩阵, $\boldsymbol{\xi}_k=(0,0,\cdots,1)^T$ 是 k 维向量. 另外,

$$T_{k,k} = \begin{bmatrix}\alpha_1 & \beta_1 & & \\ \gamma_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \gamma_{k-1} & \alpha_k & \beta_{k-1}\end{bmatrix}_{k\times k}$$

$$T_{k+1,k} = \begin{bmatrix} T_{k,k} \\ \\ \gamma_k \boldsymbol{\xi}_k^T \end{bmatrix}_{(k+1)\times k}$$

$$\tilde{T}_{k,k} = \begin{bmatrix} (T_{k+1,k})^T \\ \\ \beta_k \boldsymbol{\xi}_k^T \end{bmatrix}_{(k+1)\times k}$$

双正交条件为

$$V_{n,k}^T W_{n,k} = I \tag{5.4.30}$$

双共轭梯度 Bi-CG 算法令 $\boldsymbol{x}^k$ 取成如下形式

$$\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}^0 + V_{n,k}\boldsymbol{y}_k,$$

并选择 $\boldsymbol{y}_k$ 使 $\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{r}^0 - AV_{n,k}\boldsymbol{y}_k$ 与基向量 $\boldsymbol{w}_1, \cdots, \boldsymbol{w}_k$ 正交, 即

$$W_{n,k}^T \boldsymbol{r}^k = W_{n,k}^T \boldsymbol{r}^0 - W_{n,k}^T AV_{n,k}\boldsymbol{y}_k = 0 \tag{5.4.31}$$

将 $W_{n,k}^T$ 左乘 (5.4.28) 式, 有

$$W_{n,k}^T AV_{n,k} = W_{n,k}^T V_{n,k} T_{k,k} + \gamma_k W_{n,k}^T \boldsymbol{v}_{k+1}\boldsymbol{\xi}_k = W_{n,k}^T V_{n,k} T_{k,k}$$

并由双正交条件 (5.4.30) 可知有

$$W_{n,k}^T AV_{n,k} = T_{n,k} \tag{5.4.32}$$

又

$$W_{n,k}^T \boldsymbol{r}^0 = W_{n,k}^T \frac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}^0\|_2}\|\boldsymbol{r}^0\|_2 = W_{n,k}^T \boldsymbol{v}_1 \|\boldsymbol{r}^0\|_2 = \boldsymbol{\xi}\beta \tag{5.4.33}$$

其中 $\beta = \|\boldsymbol{r}\|_2^0$, $\boldsymbol{\xi} = (1, 0, \cdots, 0)^T$ 是 k 维向量. 将 (5.4.31) 式和 (5.4.32) 式代入 (5.4.33) 式知

$$T_{n,k}\boldsymbol{y}_k = \beta\boldsymbol{\xi}.$$

注意 $T_{n,k}$ 是三对角矩阵, 可用 LDU 分解来求解该方程得到 $\boldsymbol{y}_k$. 由上分析, 可得如下**双共轭梯度算法** (Bi-CG).

选择 $\boldsymbol{x}^0$, 计算 $\boldsymbol{r}^0 = \boldsymbol{f} - A\boldsymbol{x}^0$, 令 $\boldsymbol{p}^0 = \boldsymbol{r}^0$, 选择 $\tilde{\boldsymbol{r}}^0$, 使得 $(\tilde{\boldsymbol{r}}^0, \boldsymbol{r}^0) \neq 0$, $\tilde{\boldsymbol{p}}^0 = \tilde{\boldsymbol{r}}^0$.

对 $k \geqslant 1$, 作如下计算:

$$
\begin{aligned}
a_{k-1} &= \frac{(\boldsymbol{r}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^{k-1})}{(A\boldsymbol{p}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{p}}^{k-1})} \\
\boldsymbol{x}^k &= \boldsymbol{x}^{k-1} + a_{k-1}\boldsymbol{p}^{k-1} \\
\boldsymbol{r}^k &= \boldsymbol{r}^{k-1} - a_{k-1}A\boldsymbol{p}^{k-1} \\
\tilde{\boldsymbol{r}}^k &= \tilde{\boldsymbol{r}}^{k-1} - a_{k-1}A^T\tilde{\boldsymbol{p}}^{k-1} \\
\beta_{k-1} &= \frac{(\boldsymbol{r}^k, \tilde{\boldsymbol{r}}^k)}{(\boldsymbol{r}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^{k-1})} \\
\boldsymbol{p}^k &= \boldsymbol{r}^k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}^{k-1} \\
\tilde{\boldsymbol{p}}^k &= \tilde{\boldsymbol{r}}^{k-1} + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}^{k-1}
\end{aligned} \tag{5.4.34}
$$

§5.4.8 拟极小残量 (QMR) 法

在拟极小残量 (QMR) 法中, $\boldsymbol{x}^k$ 仍取成 Bi-CG 中的形式

$$
\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}^0 + V_{n,K}\boldsymbol{y}_k
$$

但 $\boldsymbol{y}_k$ 的选择不同, 不是极小化残量的 2- 范数. 由于

$$
\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{r}^0 - AV_{n,k}\boldsymbol{y}_k = V_{n,k+1}(\beta\boldsymbol{\xi} - T_{k+1,k}\boldsymbol{y}_k)
$$

所以

$$
\|\boldsymbol{r}^k\|_2 \leqslant \|V_{n,k+1}\|_2 \ \|\beta\boldsymbol{\xi} - T_{k+1,k}\boldsymbol{y}_k\|_2 \tag{5.4.35}
$$

我们选择 $\boldsymbol{y}_k$ 使得

$$
\|\beta\boldsymbol{\xi} - T_{k+1,k}\boldsymbol{y}_k\|_2 = \min_{\boldsymbol{y}} \|\beta\boldsymbol{\xi} - T_{k+1,k}\boldsymbol{y}\| \tag{5.4.36}
$$

取极小化 (5.4.36) 式右端的一个因子. 该极小化问题始终有解, 可通过对矩阵 $T_{k+1,k}$ 作 QR 分解的算法来求解, 由此得到下面**拟极小残量** (QMR) **算法**.

给定 $\boldsymbol{x}^0$, 计算 $\boldsymbol{r}^0 = \boldsymbol{f} - A\boldsymbol{x}^0$, $\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}^0}{\|\boldsymbol{r}\|_2}$, 给定 $\tilde{\boldsymbol{r}}^0$, 计算 $\boldsymbol{w}^1 = \frac{\tilde{\boldsymbol{r}}^0}{\|\tilde{\boldsymbol{r}}^0\|_2}$. 令 $k+1$ 维向量 $\boldsymbol{\xi} = (1, 0, \cdots, 0)^T$, $\beta = \|\boldsymbol{r}^0\|_2$. 对 $k \geqslant 1$, 执行下面的步骤:

1. 用双正交 Lanczos 算法计算 $\boldsymbol{v}^{k+1}$, $\boldsymbol{w}^{k+1}$, 三对角矩阵 $T_{k,k}$ 的元素, $a_k = t_{k,k}$, $\beta_k = t_{k,k+1}, \gamma_k = t_{k+1,k}$.

2. 对 $T_{k+1,k}$ 通过一系列 Givens 旋转 $G_k, G_{k-1}, \cdots, G_1$ 作分解. 即

$$
(G_k G_{k-1} \cdots G_1) T_{k+1,k} = \begin{pmatrix} R_{k,k} \\ 0 \end{pmatrix}
$$

3. 计算新解.$\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}^0 + P_k \boldsymbol{g}_{k\times 1}$ 或 $\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}^{k-1} + a_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}$, 其中

$$
\begin{aligned}
P_k &= (\boldsymbol{p}_0, \cdots, \boldsymbol{p}_{k-1}) = V_{n,k} R_{k,k}^{-1} \\
\boldsymbol{g}_{k\times 1} &= (G_k G_{k-1} \cdots G_1 \beta\boldsymbol{\xi}) = (a_0, a_1, \cdots, a_{k-1})^T.
\end{aligned}
$$

§5.4.9 共轭梯度平方 (CGS) 法

Bi-CG 算法可以写成

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}^k &= \varphi_k(A)\boldsymbol{r}^0,\ \tilde{\boldsymbol{r}}^k = \varphi_k(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0 \\ \boldsymbol{p}^k &= \psi_k(A)\boldsymbol{r}^0,\ \tilde{\boldsymbol{p}}^k = \psi_k(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0 \end{aligned} \tag{5.4.37}$$

其中 φ_k 和 ψ_k 是次数不超过 k 的多项式. CGS 的思想是将第 k 次残差表达式 $\boldsymbol{r}^k$ 中的 $\varphi_k(A)\boldsymbol{r}^0$ 替代成 $\varphi_k^2(A)\boldsymbol{r}^0$ 以加快收敛速度. 为此, 先将 $\varphi_k(A)\boldsymbol{r}^0$ 写成递推的形式

$$\varphi_k(A)\boldsymbol{r}^0 = \varphi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0 - \alpha_{k-1}A\psi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0 \tag{5.4.38}$$

$$\psi_k(A)\boldsymbol{r}^0 = \varphi_k(A)\boldsymbol{r}^0 + \beta_k\psi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0 \tag{5.4.39}$$

其中

$$\alpha_{k-1} = \frac{(\varphi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, \varphi_{k-1}(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{(A\psi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, \psi_{k-1}(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0)} = \frac{(\varphi_{k-1}^2(A)\boldsymbol{r}^0, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{(A\psi_{k-1}^2(A)\boldsymbol{r}^0, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}$$

$$\beta_k = \frac{(\varphi_k(A)\boldsymbol{r}^0, \varphi_k(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{(\varphi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, \varphi_{k-1}(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0)} = \frac{(\varphi_k^2(A)\boldsymbol{r}^0, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{(\varphi_{k-1}^2(A)\boldsymbol{r}^0, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}$$

由 (5.4.38) 式与 (5.4.39) 式得多项式 $\varphi_k(A)$ 和 $\psi_k(A)$ 满足如下递推关系式

$$\varphi_k(A) = \varphi_{k-1}(A) - \alpha_{k-1}A\psi_{k-1}(A) \tag{5.4.40}$$

$$\psi_k(A) = \varphi_k(A) + \beta_k\psi_{k-1}(A) \tag{5.4.41}$$

为了计算 $\varphi_k^2(A)$, 将 (5.4.40) 式和 (5.4.41) 式分别取平方, 得

$$\varphi_k^2(A) = \varphi_{k-1}^2(A) - 2\alpha_{k-1}A\varphi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A) + \alpha_{k-1}^2A^2\psi_{k-1}^2(A) \tag{5.4.42}$$

$$\psi_k^2(A) = \varphi_k^2(A) + 2\beta_k\varphi_k(A)\psi_{k-1}(A) + \beta_k^2\psi_{k-1}^2(A) \tag{5.4.43}$$

为使计算能递推进行, 还需要 $\varphi_k(A)$ 和 $\psi_k(A)$ 的表达式, 将 (5.4.41) 式右乘 (5.4.40) 式, 得

$$\varphi_k(A)\psi_k(A) = \varphi_k^2(A) + \beta_k\varphi_k(A)\psi_{k-1}(A) \tag{5.4.44}$$

为求上式中的 $\varphi_k(A)$ 和 $\psi_{k-1}(A)$, 将 (5.4.40) 式取 $k-1$ 左乘 (5.4.41) 式, 得

$$\begin{aligned} \varphi_k(A)\psi_{k-1}(A) &= \varphi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A) - \alpha_{k-1}A\psi_{k-1}^2(A) \\ &= \varphi_{k-1}^2(A) + \beta_{k-1}\varphi_{k-1}(A)\psi_{k-2}(A) - \alpha_{k-1}A\psi_{k-1}^2(A) \end{aligned} \tag{5.4.45}$$

在实际计算中, 将这些量作用于 $\boldsymbol{r}^0$, 可导致下面的向量递推关系式

$$\boldsymbol{r}^k = \varphi_k^2(A)\boldsymbol{r}^0, \quad \boldsymbol{p}^k = \psi_k^2(A)\boldsymbol{r}^0$$

$$u^k = \varphi_k(A)\psi_k(A)r^0, \quad q^k = \varphi_k(A)\psi_{k-1}(A)r^0.$$

CGS 算法

给定 x^0, 计算 $r^0 = f - Ax^0$, 令 $u^0 = r^0$, $p^0 = r^0$, $q^0 = 0$, $v^0 = Ap^0$. 选择 $\tilde{r}$ 使得 $(\tilde{r}^0, r^0) \neq 0$. 对 $k \geqslant 1$ 作如下计算.

$$\begin{aligned} q^k &= u^{k-1} - \alpha_{k-1} v^{k-1} \\ \alpha_{k-1} &= \frac{(r^{k-1}, \tilde{r}^0)}{(v^{k-1}, \tilde{r}^0)} \\ x^k &= x^{k-1} + \alpha_{k-1}(u^{k-1} + q^k) \\ r^k &= r^{k-1} - \alpha_{k-1} A(u^{k-1} + q^k) \\ \beta_k &= \frac{(r^k, \tilde{r}^0)}{(r^{k-1}, \tilde{r}^0)} \\ u^k &= r^k + \beta_k q^k \\ p^k &= u^k + \beta_k(q^k + \beta_k p^{k-1}) \\ v^k &= Ap^k \end{aligned} \tag{5.4.45}$$

§5.4.10 双共轭梯度稳定化 (BiCGSTAB) 法

在 CGS 中的残量 r^k 满足关系式 $r^k = \varphi_k^2(A)r^0$, 其中 $\varphi_k(A)r^0$ 是 Bi-CG 的残量. 但 Bi-CG 中的残量在某一步增加时, CGS 的残量将会是近似平方的量增加; 这导致 CGS 收敛的振荡, 为了避免收敛性出现大的振荡. 将残量写成下面的形式

$$r^k = Q_k(A)\varphi_k(A)r^0 \tag{5.4.46}$$

其中 φ_k 仍是 Bi-CG 中的多项式, 但 $Q_k(A)$ 选择为

$$Q_k(A) = (1 - \omega_k A)(1 - \omega_{k-1}A)\cdots(1 - \omega_1 A) \tag{5.4.47}$$

并使得第 k 次迭代的极小化残量 r^k 总体上仍有 CGS 的快速收敛性, 即系数 $w_i(i = 1, \cdots, k)$ 满足

$$\min_{w_k} \|r^k\|_2 = \min_{w_k} \|(I - \omega_k)Q_{k-1}(A)\varphi_k(A)r^0\|_2 \tag{5.4.48}$$

这导致 BiCGSTAB 算法.

在 BiCGSTAB 算法中, 残量和方向有如下的递推关系

$$\begin{aligned} r^k &= Q_k(A)\varphi_k(A)r^0 \\ p^k &= Q_k(A)\psi_k(A)r^0 \end{aligned} \tag{5.4.49}$$

由关系式 (5.4.40)~(5.4.41), 并将 (5.4.47) 式代入 (5.4.49) 式有

$$\begin{aligned} r^k &= (I - \omega_k A)Q_{k-1}(A)[\varphi_{k-1}(A) - \alpha_{k-1}A\psi_{k-1}(A)]r^0 \\ &= (I - \omega_k A)(r^{k-1} - \alpha_{k-1}Ap^{k-1}) \\ p^k &= Q_k(A)[\varphi_k(A) + \beta_k \psi_{k-1}\psi_{k-1}(A)]r^0 \\ &= r^k + \beta_k(I - \omega_k A)p^{k-1} \end{aligned} \tag{5.4.50}$$

最后需要将 Bi-CG 中的系数 α_{k-1} 和 β_k 用新的向量表示. 根据 Bi-CG 多项式的正交性, 有关系式

$$(\varphi_k(A)\boldsymbol{r}^0, \varphi_{k-1}(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0) = (-1)^{k-1}\alpha_{k-2}\cdots\alpha_0(\varphi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, (A^T)^{k-1}\tilde{\boldsymbol{r}}^0)$$
$$(A\psi_k(A)\boldsymbol{r}^0, \psi_{k-1}(A^T)\tilde{\boldsymbol{r}}^0) = (-1)^{k-1}\alpha_{k-2}\cdots\alpha_0(A\psi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, (A^T)^{k-1}\tilde{\boldsymbol{r}}^0)$$

于是

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0) &= (Q_{k-1}\varphi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, \tilde{\boldsymbol{r}}^0) = (A\varphi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, Q_{k-1}(A^T)\tilde{\mathbf{r}}^0)\\ &= (-1)^{k-1}\omega_{k-1}\cdots\omega_1(\varphi_{k-1}(A)\mathbf{r}^0, (A^T)^{k-1}\tilde{\mathbf{r}}^0)\\ (A\boldsymbol{p}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0) &= (Q_{k-1}(A)A\psi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, \tilde{\boldsymbol{r}}^0) = (A\psi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, Q_{k-1}(A)\tilde{\boldsymbol{r}}^0)\\ &= (-1)^{k-1}\omega_{k-1}\cdots\omega_1(A\psi_{k-1}(A)\boldsymbol{r}^0, (A^T)^{k-1}\tilde{\boldsymbol{r}}^0)\end{aligned}$$

因此 α_{k-1} 和 β_k 可用新系数表示为

$$\alpha_{k-1} = \frac{(\boldsymbol{r}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{(A\boldsymbol{p}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}, \qquad \beta_k = \frac{\alpha_{k-1}(\boldsymbol{r}^k, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{\omega_k(\boldsymbol{r}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}$$

BiCGSTAB 算法

选择 $\boldsymbol{x}^0$, 计算 $\boldsymbol{r}^0 = \boldsymbol{f} - A\boldsymbol{x}^0$, $\boldsymbol{p}^0 = \boldsymbol{r}^0$. 选择 $\tilde{\boldsymbol{r}}^0$ 使得 $(\boldsymbol{r}^0, \tilde{\boldsymbol{r}}^0) \neq 0$. 对 $k \geqslant 1$, 执行如下计算:

$$\begin{aligned}\alpha_{k-1} &= \frac{(\boldsymbol{r}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{(A\boldsymbol{p}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}\\ \boldsymbol{x}^{k-\frac{1}{2}} &= \boldsymbol{x}^{k-1} + \alpha_{k-1}\boldsymbol{p}^{k-1}\\ \boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}} &= \boldsymbol{r}^{k-1} - \alpha_{k-1}A\boldsymbol{p}^{k-1}\\ \omega_k &= \frac{(\boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}}, A\boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}})}{(A\boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}}, A\boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}})}\\ \boldsymbol{x}^k &= \boldsymbol{x}^{k-\frac{1}{2}} + \omega_k\boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}}\\ \boldsymbol{r}^k &= \boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}} - \omega_k A\boldsymbol{r}^{k-\frac{1}{2}}\\ \beta_k &= \frac{\alpha_{k-1}}{\omega_k}\frac{(\boldsymbol{r}^k, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}{(\boldsymbol{r}^{k-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}^0)}\\ \boldsymbol{p}^k &= \boldsymbol{r}^k + \beta_k(\boldsymbol{p}^{k-1} - \omega_k A\boldsymbol{p}^{k-1})\end{aligned} \tag{5.4.51}$$

§5.5 多重网格法

在残量校正格式中我们提到, 与迭代矩阵小特征值有关的误差将很快消除, 大部分的计算是消除与大特征值有关的误差. 多重网格的基本思想是快速消除误差的高频分量. 为此, 我们使误差的高频分量与迭代矩阵的最小特征值对应, 这可以通过问题变换到一个粗网格 (大步长) 上实现, 在该网格上误差的低频分量相应于以前细网格上的高频分量, 然而我们在这个粗网格上快速消除误差的低频分量, 这个过程可以逐级重复, 最后的结果被变换到细网格上.

§5.5.1 低频分量与高频分量

考虑 Poisson 方程的差分格式 (4.8.3)~(4.8.7). 为简单起见, 取 $\Delta x = \Delta y$, $M_x = M_y = M$, $f_{i,j} = 0$, $g_{i,j} = 0$, 且使 M 满足 $M = 2^N$. 显然, 齐次差分方程对应的方程组 $A\boldsymbol{u} = 0$ 有唯一零解 $\boldsymbol{u} = 0$. 现设初始猜测为

$$\boldsymbol{u}_0 = \sum_{s=1}^{M-1}\sum_{p=1}^{M-1} \boldsymbol{w}^{p,s} \tag{5.5.1}$$

其中 $\boldsymbol{w}^{p,s}(p, s = 1, \cdots, M-1)$ 是 A 的特征向量. 注意根据这一初始猜测, 初始误差为 $\boldsymbol{e}_0 = -\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_0 = -\boldsymbol{u}_0$. 为了简便, 初始误差记为 $-\boldsymbol{e}_0 = \boldsymbol{u}_0$. 由式 (5.2.18) 知, 系数矩阵 A 的特征值为

$$\mu_s^p = \frac{1}{\Delta x^2}(2 - \cos\frac{p\pi}{M} - \cos\frac{s\pi}{M}) \tag{5.5.2}$$

$$= \frac{4}{\Delta x^2}(\sin^2\frac{p\pi}{2M} + \sin^2\frac{s\pi}{2M}), \quad p, s = 1\cdots, M-1 \tag{5.5.3}$$

相应的特征值向量分量为

$$w_{j,k}^{p,s} = \sin\frac{jp\pi}{M}\sin\frac{ks\pi}{M}, \quad j, k = 1, \cdots, M-1; \quad p, s = 1, \cdots, M-1 \tag{5.5.4}$$

注意这些特征向量是正交的 (这使我们的计算更容易). 当 p 或 s 小时, $\boldsymbol{w}^{p,s}$ 变化较缓慢, 当 p 或 s 大时, $\boldsymbol{w}^{p,s}$ 更加振荡, 这具有一般性. 通常, 我们称相对慢变化的特征向量为**平滑**或**低频向量**, 更加振荡的特征向量为**振荡**或**高频向量**.

§5.5.2 网格变换

考虑区域 $R = (0,1) \times (0,1)$. 与前面一样, $M_x = M_y = M$, 选择 $M = 2^N$. 考虑 R 上的一个均匀网格, $h = \Delta x = \Delta y = \frac{1}{M}$, 用 G^h 表示, 然后类似定义 G^h 的一系列粗网格 $G^{2h}, G^{4h}, \cdots, G^{\frac{1}{2}}$.

下面将定义从 G^h 到 G^{2h} 及 G^{2h} 到 G^h 的网格变换, 其他的到粗网格或到细网格的变换也类似. 用 I_h^{2h} 表示从 G^h 到 G^{2h} 的网格变换, $I_h^{2h} : G^h \to G^{2h}$. 算子 I_h^{2h} 称为**限制算子**. 限制算子将细网格上的值近似到粗网格上. 全加权是一种限制算子, 若令 $I_h^{2h}\boldsymbol{u}^h = \boldsymbol{u}^{2h}$, 则**全加权算子**的分量形式定义为

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{2h} = \tfrac{1}{16}[&u_{2i-1,2j-1}^h + u_{2i-1,2j+1}^h + u_{2i+1,2j+1}^h + u_{2i+1,2j-1}^h + \\ &2(u_{2i,2j-1}^h + u_{2i,2j+1}^h + u_{2i-1,2j}^h + u_{2i+1,2j}^h) + 4u_{2i,2j}^h], \quad i, j = 1, \cdots, \tfrac{M}{2} - 1 \end{aligned}$$

全加权算子将粗网格上的值定义成细网格上的加权平均.

另一种限制是由 $I_h^{2h}\boldsymbol{u}^h = \boldsymbol{u}^{2h}$ 定义的**单射算子**, 其中分量形式定义为

$$u_{i,j}^{2h} = u_{2i,2j}^h, \quad i, j = 1, \cdots, \frac{M}{2} - 1 \tag{5.5.5}$$

显然单射算子 I_h^{2h} 比全加权算子 I_h^{2h} 更容易计算.

为将粗网格上的值近似到细网格上, 利用**延拓算子** 或**插值算子**I_{2h}^h. 最常规的延拓算子是线性延拓, 其中 $I_{2h}^h : G^{2h} \to G^h$ 由 $I_{2h}^h \boldsymbol{u}^{2h} = \boldsymbol{u}^h$ 定义, 其分量形式定义为

$$u_{2i,2j}^h = u_{i,j}^{2h} \tag{5.5.6}$$

$$u_{2i+1,2j}^h = \frac{1}{2}(u_{i,j}^{2h} + u_{i+1,j}^{2h}) \tag{5.5.7}$$

$$u_{2i,2j+1}^h = \frac{1}{2}(u_{i,j}^{2h} + u_{i,j+1}^{2h}) \tag{5.5.8}$$

$$u_{2i+1,2j+1}^h = \frac{1}{4}(u_{i,j}^{2h} + u_{i+1,j}^{2h} + u_{i,j+1}^{2h} + u_{i+1,j+1}^{2h}) \tag{5.5.9}$$

$$i, j = 0, \cdots, \frac{M}{2} - 1 \tag{5.5.10}$$

显然插值算子 I_{2h}^h 在 G^h 上产生一个更光滑解.

现以一维初边值问题

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in (0,1) \tag{5.5.11}$$

$$u(0) = u(1) = 0 \tag{5.5.12}$$

为例, 其差分方程为

$$-\frac{1}{\Delta x^2}(u_{i,j-1} - 2u_j + u_{j+1}) = 0, \quad i = 1, \cdots, M-1 \tag{5.5.13}$$

$$u_0 = u_M = 0. \tag{5.5.14}$$

现采用全加权作为限制算子, 采用线性算子作为延拓算子, 取 $M = 8$. 注意到差分方程在 G^h 上可写成

$$A^h \boldsymbol{u}^h = \frac{1}{\Delta x}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & & \\ & & 1 & -2 & 1 & & \\ & & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^h \\ u_2^h \\ u_3^h \\ u_4^h \\ u_5^h \\ u_6^h \\ u_7^h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{0}^h$$

记 G^h 网格上三对角矩阵 A 的特征值向量为 $\boldsymbol{w}_j^h (j = 1, \cdots, 7)$. 由定理 1.3.1 知, $\boldsymbol{w}_j^h$ 的第 s 个分量是 $w_{js}^h = \sin\frac{js\pi}{8}$. G^h 网格上值可以写成

$$\boldsymbol{u}^h = \sum_{j=1}^{M-1} \alpha_j \boldsymbol{w}_j^h$$

因为 I_h^{2h} 是线性的, 所以 G^{2h} 上的值为

$$u^{2h} = I_h^{2h} u^h = \sum_{j=1}^{M-1} \alpha_j I_h^{2h} w_j^h$$

注意差分在 G^{2h} 网格上 ($M_x = M_y = 4$) 的解可表示为

$$A^{2h} u^{2h} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{2h} \\ u_2^{2h} \\ u_3^{2h} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}^{2h}$$

A^{2h} 的特征向量是 $w_j^{2h}(j = 1, 2, 3)$. w_j^{2h} 的第 s 个分量是 $w_{js}^{2h} = \sin \dfrac{js\pi}{4}(s = 1, 2, 3)$. I_h^{2h} 和 I_{2h}^h 可以写成矩阵形式

$$I_h^{2h} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \tag{5.5.15}$$

和

$$I_{2h}^h = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{5.5.16}$$

从而

$$I_h^{2h} w_1^h = \begin{bmatrix} \sin\dfrac{\pi}{8} + 2\sin\dfrac{2\pi}{8} + \sin\dfrac{3\pi}{8} \\ \sin\dfrac{3\pi}{8} + 2\sin\dfrac{4\pi}{8} + \sin\dfrac{5\pi}{8} \\ \sin\dfrac{5\pi}{8} + 2\sin\dfrac{6\pi}{8} + \sin\dfrac{7\pi}{8} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4\cos^2\dfrac{\pi}{16}\sin\dfrac{\pi}{4} \\ 4\cos^2\dfrac{\pi}{16}\sin\dfrac{2\pi}{4} \\ 4\cos^2\dfrac{\pi}{16}\sin\dfrac{3\pi}{4} \end{bmatrix} = \cos^2\frac{\pi}{16} w_1^{2h}$$

类似地, 分别可以算得

$$I_h^{2h} w_2^h = \cos^2\frac{2\pi}{16} w_2^{2h}, \quad j = 2$$

$$I_h^{2h} w_3^h = \cos^2\frac{3\pi}{16} w_3^{2h}, \quad j = 3$$

$$I_h^{2h} w_4^h = \mathbf{0}^{2h}, \quad j = 4$$

$$I_h^{2h} w_{M-j}^h = -\sin^2\frac{j\pi}{16} w_j^{2h}, \quad j = 1, 2, 3$$

一般地, 对限制算子 I_h^{2h}, 我们有

$$I_h^{2h}\boldsymbol{w}_j^h = \cos^2\frac{j\pi}{2M}\boldsymbol{w}_j^{2h},\quad j=1,\cdots,\frac{M}{2}-1 \tag{5.5.17}$$

$$I_h^{2h}\boldsymbol{w}_{M/2}^h = \boldsymbol{0}^{2h} \tag{5.5.18}$$

$$I_h^{2h}\boldsymbol{w}_{M-j}^h = -\sin^2\frac{j\pi}{2M}\boldsymbol{w}_j^{2h},\quad j=1,\cdots,\frac{M}{2}-1 \tag{5.5.19}$$

对插值算子 I_{2h}^h, 有

$$I_{2h}^h\boldsymbol{w}_j^{2h} = \cos^2\frac{j\pi}{2M}\boldsymbol{w}_j^h - \sin^2\frac{j\pi}{2M}\boldsymbol{w}_{M-j}^h,\quad j=1,\cdots,\frac{M}{2}-1 \tag{5.5.20}$$

由 (5.5.20) 式可知, 即使开始仅有误差的低频分量 $(1\leqslant j\leqslant M/2-1)$, 则粗网格校正会引进了高频成份, 因此在细网格 G^h 上松弛是必要的, 以消除由 I_{2h}^h 引进的高频成分. 注意当 $j<<\dfrac{M}{2}$ 时,

$$I_{2h}^h\boldsymbol{w}_j^{2h} = (1-O((\frac{j}{M})^2))\boldsymbol{w}_j^h + O((\frac{j}{M})^2)\boldsymbol{w}_{M-j}^h$$

因此, 粗网格校正后 I_{2h}^h 引进的高频分量是小量. 同时也看到 I_{2h}^h 对低频分量影响不大. 类似我们还知道, 对初始猜测中误差的高频分量, 粗网格校正后会引起低频分量但是小量.

§5.5.3 粗网格校正

前面看到, 假如 $\boldsymbol{w}$ 是 $A\boldsymbol{u}=\boldsymbol{f}$ 的一个近似解, $\boldsymbol{r}$ 是残量 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{f}-A\boldsymbol{w}$, 则 $A\boldsymbol{e}=\boldsymbol{r}$ 的解是误差, 于是精确解为 $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{w}+\boldsymbol{e}$. 残量校正格式是迭代求解 $A\boldsymbol{e}=\boldsymbol{r}$ 的近似解, 然而加到 $\boldsymbol{w}$ 上, 粗网格校正是另一种残量校正格式, 它在粗网格上求解 $A\boldsymbol{e}=\boldsymbol{r}$ 的近似解. 一般地, 考虑在网格 G^h 上求解 $A\boldsymbol{u}^h=\boldsymbol{r}^h$, G^{2h} 表示相关的粗网格,A^{2h} 是粗网格上的矩阵, 下面是粗网格校正格式

(1) 在 G^h 上, 在 $A^h\boldsymbol{u}^h=\boldsymbol{f}^h$ 上松弛 m_1 次, 得结果 $\boldsymbol{u}_{m_1}^h$, 其中初始猜测为 $\boldsymbol{u}_0^h$.

(2) 计算 $\boldsymbol{r}^h=\boldsymbol{f}^h-A^h\boldsymbol{u}_{m_1}^h$.

(3) 计算 $\boldsymbol{f}^{2h}=I_h^{2h}\boldsymbol{r}^h$.

(4) 在 G^{2h} 上, 求解 $A^{2h}\boldsymbol{e}^{2h}=\boldsymbol{f}^{2h}$.

(5) 校正细网格近似 $\hat{\boldsymbol{u}}_{m_1}^h=\boldsymbol{u}_{m_1}^h+I_{2h}^h\boldsymbol{e}^{2h}$.

(6) 在 G^h 上以 $\hat{\boldsymbol{u}}_{m_1}^h$ 为初始猜测, 在 $A^h\boldsymbol{u}^h=\boldsymbol{f}^h$ 上松弛 m_2 次, 得结果 $\hat{\boldsymbol{u}}_{m_2}^h$.

粗网格校正格式的另一种方法是多重网格的粗网格迭代校正. 下面给出最常用的 V 循环多重网格算法. 一个四重网格的 V 循环可由下述步骤组成:

(1) 以 $\boldsymbol{u}_0^h$ 为初值, 在细网格上对 $A^h\boldsymbol{u}^h=\boldsymbol{f}^h$ 做 m_1 次迭代, 得近似值 $\boldsymbol{u}_{m_1}^h$ 及残量

$$\boldsymbol{r}^h=\boldsymbol{f}^h-A^h\boldsymbol{u}_{m_1}^h$$

(2) 在第二层网格上以 $e_0^{2h}=0$ 为初值, 对

$$A^{2h}e^{2h}=f^{2h}=I_h^{2h}r^h$$

进行 m_1 次迭代, 得 $e_{m_1}^{2h}$ 及残量

$$r^{2h}=f^{2h}-A^{2h}e_{m_1}^{2h}$$

(3) 在第三层网格上以 $e_0^{4h}=0$ 为初值, 对

$$A^{4h}e^{4h}=f^{4h}=I_{2h}^{4h}r^{2h}$$

进行 m_1 次迭代, 得 $e_{m_1}^{4h}$ 及残量

$$r^{4h}=f^{4h}-A^{4h}e_{m_1}^{4h}$$

(4) 在第四层网格上以 $e_0^{8h}=0$ 为初值, 对

$$A^{8h}e^{8h}=f^{8h}=I_{4h}^{8h}r^{4h}$$

进行 m_1 次迭代, 得 $e_{m_1}^{8h}$ 及残量

$$r^{8h}=f^{8h}-A^{8h}e_{m_1}^{8h}$$

(5) 对 $e_{m_1}^{4h}$ 作修正, $\hat{e}_{m_1}^{4h}=e_{m_1}^{4h}+I_{8h}^{4h}e_{m_1}^{8h}$, 然后再以新的 $e_0^{4h}=\hat{e}_{m_1}^{4h}$ 为初值, 对 $A^{4h}e^{4h}=f^{4h}$ 作 m_2 次迭代得到结果 $\hat{e}_{m_2}^{4h}$.

(6) 对 $\hat{e}_{m_2}^{4h}$ 作修正, $\hat{e}_{m_1}^{2h}=e_{m_1}^{2h}+I_{4h}^{2h}\hat{e}_{m_2}^{4h}$. 然后以 $\hat{e}_0^{2h}=\hat{e}_{m_1}^{2h}$ 为初值, 对 $A^{2h}e^{2h}=f^{2h}$ 作 m_2 次迭代得 $\hat{e}_{m_2}^{2h}$.

(7) 校正到细网格上 $\hat{u}_{m_1}^h=u_{m_1}^h+I_{2h}^h\hat{e}_{m_2}^{2h}$.

(8) 在 G^h 上, 以 $u_0^h=\hat{u}_{m_1}^h$ 为初值, 对 $A^hu^h=f^h$ 迭代 m_2 次, 得到结果 $\hat{u}_{m_2}^h$.

这一循环像一个 V 字形, 如图 5.2 所示, 称为$V(m_1,m_2)$ **循环**. 还有其他多重网格循环格式, 如 W 循环和 FMV 循环, 可参考相关文献, 如文献[41].

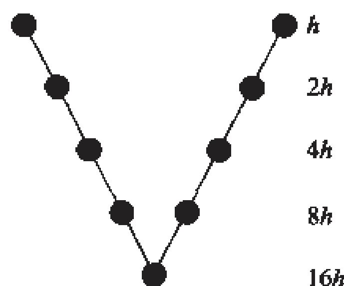


图 5.2 V 循环

§5.6 平行迭代算法

对线性方程组 $Ax = \boldsymbol{f}$, 将系数矩阵 $A_{n\times n}$ 作形如 $A = D + L + U$ 的分解, 其中 D 为对角线矩阵, L 和 U 分别是对角线元素为零的下三角阵和上三角阵. 下面考虑几种简单迭代法的并行实现.

§5.6.1 Jacobi 迭代法

Jacobi 迭代公式是

$$x_i^k = \frac{1}{a_{ii}}(f_i - \sum_{j=1,j\neq i}^{n} a_{ij}x_j^{k-1}) \tag{5.6.1}$$
$$i = 1, 2\cdots, n, \quad k = 1, 2, \cdots$$

由该式可知, Jacobi 迭代的每一步的值只依赖于上一步迭代的值, 具有很高的并行度. Jacobi 迭代并行求解步骤如下:

1. 各节点以某种方法求得本机上的初值 $x^{k-1} (k \geqslant 1)$, 并交换交界处的 x^{k-1}.
2. 各节点并行地利用 (5.6.1) 由 x^{k-1} 求本机上的 x^k.
3. 以某种方式求出迭代误差, 若满足要求, 结束, 否则, 各节点交换交界处的 $x^{(k)}$, k 增加 1, 返回 2.

§5.6.2 G-S 迭代

Gauss-Seidel 的迭代公式是

$$x_i^k = -\frac{1}{a_{ii}}(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^k + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{k-1} - f_i), \quad i = 1, 2\cdots, n, \quad k = 1, 2, \cdots \tag{5.6.2}$$

直接按 (5.6.2) 式并行计算需要大量的通信和同步操作. 可以通过对网格点进行红黑排序的方法来实现 G-S 迭代的并行计算. 如对 Poisson 方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f(x, y) \tag{5.6.3}$$

在正方形网格上的差分格式为 (取网格步长为 h)

$$u_{i,j} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} + h^2 f_{i,j}) \tag{5.6.4}$$

使用 G-S 迭代公式, 得

$$u_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{4}(u_{i,j-1}^{k+1} + u_{i-1,j}^{k+1} + u_{i,j+1}^{k} + u_{i+1,j}^{k} + h^2 f_{i,j}) \tag{5.6.5}$$

采用红黑排序方式, 将结点分成红、黑两个集, 当 $i+j$ 为偶数时, 结点 (i,j) 记为红点, 当 $i+j$ 为奇数时, 结点 (i,j) 记为黑点. G-S 迭代的并行计算步骤为

1. 各处理机以某种方式得到初始值 $u^k, k=0$.
2. 各处理机并行地对 $i+j$ 为偶数的红点计算

$$u_{i,j}^{k+1}=\frac{1}{4}(u_{i,j-1}^{k+1}+u_{i-1,j}^{k+1}+u_{i,j+1}^{k}+u_{i+1,j}^{k}+h^2 f_{i,j}) \tag{5.6.6}$$

3. 各处理机交换边界数据后, 并行地对 $i+j$ 为奇数地黑点计算

$$u_{i,j}^{k+1}=\frac{1}{4}(u_{i,j-1}^{k+1}+u_{i-1,j}^{k+1}+u_{i,j+1}^{k}+u_{i+1,j}^{k}+h^2 f_{i,j}) \tag{5.6.7}$$

注意右端的四个 u 值为红点上的值, 已由 (5.6.6) 式算出, 因此这一步可以并行计算所有黑点的修正值.

4. 若误差已满足要求, 则停止, 否则, 各处理机交换边界数据, k 增加 1, 返回 2.

§5.6.3 逐次超松弛 (SOR) 迭代法

对差分格式 (5.6.4), 逐次超松弛的迭代格式是

$$u_{i,j}^{k+1}=(1-\omega)u_{i,j}^{k}+\frac{1}{4}\omega(u_{i,j-1}^{k+1}+u_{i-1,j}^{k+1}+u_{i,j+1}^{k}+u_{i+1,j}^{k}+h^2 f_{i,j}) \tag{5.6.8}$$

其中 $\omega>0$ 为松弛因子. $\omega=1$ 即为 G-S 迭代法, 类似 G-S 迭代法, 使用红黑排序同样可对 (5.6.8) 式实现并行计算. 读者自己写出并行算法.

§5.6.4 线迭代法

以上介绍的几种方法仅考虑对单个结点的迭代修正, 线迭代方法则是考虑一条网格线上全部结点的迭代修正. 对差分格式 (5.6.4), 线 Jacobi 迭代公式为

$$u_{i-1,j}^{k+1}+4u_{i,j}^{k+1}+u_{i+1,j}^{k+1}=-f_{i,j}-u_{i,j+1}^{k}-u_{i,j-1}^{k} \tag{5.6.9}$$

上式左端表明, 完成第 j 条网格线的一次迭代要求解一个三对角线方程组, 可利用追赶法求解. 计算步骤与逐点修正情形类似.

若在 (5.6.9) 式中用 $u_{i,j-1}^{k+1}$ 替换 $u_{i,j-1}^{k}$, 则得到线 G-S 迭代法公式, 即

$$u_{i-1,j}^{k+1}+4u_{i,j}^{k+1}+u_{i+1,j}^{k+1}+u_{i,j-1}^{k+1}=-f_{i,j}-u_{i,j+1}^{k}$$

用上式计算时, 将网格线分成红线和黑线两组, 首先利用黑线上前一次迭代值计算红线上的迭代值, 全部红线的值可以同时计算, 然后利用红线已迭代修正的值计算黑线上的迭代值, 所有黑线上的值可同时计算.

对线超松弛迭代法, 首先计算

$$u_{i-1,j}^{k+1}(G)-4u_{i,j}^{k+1}(G)+u_{i+1,j}^{k+1}(G)=-f_{i,j}-u_{i,j+1}^{k}-u_{i,j-1}^{k} \tag{5.6.10}$$

其中 $u_{i,j}^k(G)$ 表示线 G-S 迭代法的第 k 次迭代值, 然后, 将 $u_{i,j}^k$ 替换 $u_{i,j}^{k+1}(G)$, 并作线性插值

$$u_{i,j}^{k+1} = (1-\omega)u_{i,j}^k + \omega u_{i,j}^{k+1} \tag{5.6.11}$$

线超松弛迭代法的并行计算与线 G-S 迭代法类似.

练 习

1. 考虑一维模型问题

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in (0,1)$$
$$u(0) = u(1) = 0$$

有限差分近似是

$$-\frac{1}{\Delta x^2}u_{j-1} + \frac{2}{\Delta x^2}u_j - \frac{1}{\Delta x^2}u_{j+1} = 0, \quad j = 1, \cdots, M-1$$
$$u_0 = u_M = 0$$

(a) 证明差分方程的系数矩阵的特征值和特征向量分别为

$$\mu_j = \frac{4}{\Delta x^2}\sin^2\frac{j\pi}{2M}$$
$$\boldsymbol{w}_j = [\sin\frac{j\pi}{M}, \sin\frac{2j\pi}{M}, \cdots, \sin\frac{(M-1)j\pi}{M}], \quad j = 1, \cdots, M-1$$

(b) 令 R_J 表示加权 Jacobi 格式的迭代矩阵, 证明 R_J 的特征值和特征向量为

$$\lambda_j = 1 - 2\omega\sin^2\frac{j\pi}{2M}, \quad j = 1, \cdots, M-1$$

(c) 令 $M = 16, \omega = \frac{2}{3}$. 用加权 Jacobi 格式求解. 中止准则是连续两次迭代的上确界范数小于 10^{-4}.

2. 设用 G-S 迭代方法求解线性代数方程组 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{f}$. 设 $\boldsymbol{x}^k$ 是迭代解, 若记 $\boldsymbol{e}^k = \boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^{k-1}$. 证明对足够大的 k, G-S 迭代矩阵近似由 $\|\boldsymbol{e}^k\|_2/\|\boldsymbol{e}^{k-1}\|_2$ 给出.

3. 取任意初值, 如 $\boldsymbol{x}^0 = (0,0)^T$, 用 CG 算法求解方程组

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 = 5 \\ x_1 + 2x_2 = 5 \end{cases}$$

4. 取均匀网格步长 $h = 1$, 在正方形域 $[0,3]\times[0,3]$ 上求解第一类 Laplace 方程 $\Delta u = 0$, 边界上的 u 值取成 $x^2 - y^2$. 分别用 Jacobi 迭代和 G-S 迭代计算.

5. 考虑线性二阶方程

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x), \quad 0 \leqslant x \leqslant 1 \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$

取均匀网格步长 $\Delta x = h = 1/M$. 用 n 表示“旧值”, $n+1$ 表示“新值”, $n=0$ 时表示初始猜测.

(1) 取迭代格式为

$$\frac{u_{i+1}^n - u_i^{n+1} + u_{i-1}^n}{h^2} = f_i, \quad i = 2, 3, \cdots, M-1 \tag{1}$$

其中 $u_1^{n+1} = 0$, $u_M^{n+1}=0$, $u_i^0 = 0 (i = 1, 2, \cdots, M)$, $f_i = f(x_i)$.

(a) 说明该迭代方法就是 Jacobi 迭代方法.

(b) 记 $\delta u_i = u_i^{n+1} - u_i^n$ 是两次迭代的变化, 将迭代格式写成下面的形式

$$\frac{2}{h^2}\delta u_i = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2} - f_i \tag{2}$$

其中右边是截断误差. 若引进时间步长 Δt, 通过对 (2) 式在 (i, n) 点处的截断误差的分析说明该迭代方法与下面带源项的热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - f \tag{3}$$

相容的条件.

(c) 当 $f(x) = -\pi^2 \sin \pi x$ 时, 验证上面 (3) 式的精确解是 $u(x,t) = (1 - e^{-\pi^2 t}) \sin \pi x$.

(2) 取迭代格式为

$$\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^{n+1}}{h^2} = f_i \tag{4}$$

该格式是否是隐式格式? 是否相应于 G-S 迭代格式? 其 “δ 形式” 是

$$-\frac{1}{h^2}\delta u_{i-1} + \frac{2}{h^2}\delta u_i = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2} - f_i \tag{5}$$

上式 (5) 与热传导方程 (3) 相容的条件是什么? 求相容时的截断误差, 并与 (1) 中的截断误差阶比较, 说明哪一种迭代格式收敛得更快?

6. 考虑 Poisson 方程第一边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1) \\ u(x,y) = g(x,y), \quad (x,y) \in \partial\Omega \end{cases}$$

其中 $\partial\Omega$ 表示 Ω 的边界, 其菱形 5 点差分格式是

$$\begin{cases} \dfrac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \dfrac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} = f_{i,j}, \quad (i,j) \in \Omega \\ u_{i,j} = g_{i,j}, \quad (i,j) \in \partial\Omega \end{cases}$$

设 $u_{i,j}^n$ 表示第 n 次的已知迭代值,$u_{i,j}^{n+1}$ 表示第 $n+1$ 次的未知迭代值, 构造如下三种迭代格式

(1)

$$\frac{u_{i+1,j}^n-2u_{i,j}^{n+1}+u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2}+\frac{u_{i,j+1}^n-2u_{i,j}^{n+1}+u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2}=f_{i,j}$$

(2)

$$\frac{u_{i+1,j}^n-2u_{i,j}^{n+1}+u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2}+\frac{u_{i,j+1}^n-2u_{i,j}^{n+1}+u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2}=f_{i,j}$$

(3)

$$\frac{u_{i+1,j}^n-2\tilde{u}_{i,j}^n+u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2}+\frac{u_{i,j+1}^n-2\tilde{u}_{i,j}^n+u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2}=f_{i,j}$$

$$u_{i,j}^{n+1}=u_{i,j}^n+\omega(\tilde{u}_{i,j}^n-u_{i,j}^n)$$

(a) 说明上面三种迭代格式分别就是 Jacobi 迭代法, G-S 迭代法和 SOR 逐次超松弛迭代法.

(b) 将 n 作为时间指标 $(t=n\Delta t)$, 记 $u_{i,j}^n=u(i\Delta x,j\Delta y,n\Delta t)$. 用 Von Neumann 方法推导这三种迭代方法的稳定性条件.

第六章　抛物型方程

本章介绍抛物型方程的差分方法. 首先讨论常系数扩散方程的一些典型的差分格式及相应的稳定性分析, 然后讨论变系数及非线性抛物型方程的差分方法, 最后讨论高维抛物型方程及抛物型方程组的差分方法.

§6.1 一维常系数扩散方程

考虑一维常系数扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in \mathbf{R}, \quad t > 0 \tag{6.1.1}$$

这里 a 为正常数. 设时间 t 的步长为 Δt, 空间 x 的步长为 h, 记 $u(x,t) = u(jh, k\Delta t)$. 下面推导一些典型的差分格式.

§6.1.1 向前和向后差分格式

向前差分格式为

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} = 0 \tag{6.1.2}$$

截断误差为 $O(\Delta t + h^2)$, 其增长因子为

$$G(\Delta t, \sigma) = 1 - 4ar\sin^2\frac{\sigma h}{2} \tag{6.1.3}$$

其中 $r = \frac{\Delta t}{h^2}$. 如果 $ar \leqslant \frac{1}{2}$, 则 $|G(\Delta t, \sigma)| \leqslant 1$, 即 von Neumann 条件满足, 由于 (6.1.2) 式是单层格式, 所以向前差分格式的稳定性条件是 $ar \leqslant \frac{1}{2}$.

向后差分格式为

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} = 0 \tag{6.1.4}$$

截断误差为 $O(\Delta t + h^2)$, 其增长因子为

$$G(\Delta t, \sigma) = \frac{1}{1 + 4ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}} \tag{6.1.5}$$

由于 $a > 0$, 所以对任何网格比 r, 都有 $|G(\Delta t, \sigma)| \leqslant 1$.该格式无条件稳定.向前和向后差分格式都是时间一阶精度、空间二阶精度的两层格式. 向前格式是显式,向后格式是隐式.

§6.1.2 加权隐式格式

该格式是向前显式格式

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^{k-1} - 2u_j^{k-1} + u_{j-1}^{k-1}}{h^2} = 0 \tag{6.1.6}$$

和向后隐式格式

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} = 0 \tag{6.1.7}$$

的加权组合

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\Delta t} = a\theta\frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} + a(1-\theta)\frac{u_{j+1}^{k-1} - 2u_j^{k-1} + u_{j-1}^{k-1}}{h^2} \tag{6.1.8}$$

或

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\Delta t} = a\theta\frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_j^k + a(1-\theta)\frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_j^{k-1} \tag{6.1.9}$$

其中 $0 \leqslant \theta \leqslant 1$ 是权系数, 称 (6.1.8) 为**加权隐式格式**, 结点分布如图 6.1.

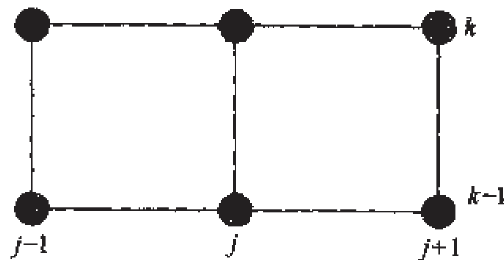


图 6.1 差分格式结点示意图

设 $u(x,t)$ 是方程 (6.1.1) 的充分光滑解, 将 (6.1.8) 式在 (x_j, t_k) 处作 Taylor 级数展开, 并化简得截断误差

$$E = a(\frac{1}{2} - \theta)\Delta t\left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t}\right]_j^k + O(\Delta t^2 + h^2) \tag{6.1.10}$$

由此可看出, 当 $\theta \neq \frac{1}{2}$ 时, 截断误差为 $O(\Delta t + h^2)$; 当 $\theta = \frac{1}{2}$ 时, 截断误差为 $O(\Delta t^2 + h^2)$. 称 $\theta = \frac{1}{2}$ 时的差分格式

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\Delta t} = \frac{a}{2h^2}\delta_x^2(u_j^{k+1} + u_j^k) \tag{6.1.11}$$

为 **Crank-Nicolson 格式或 CN 格式**, 这是一个二阶精度格式. 当 $\theta = 1$, 即向后差分格式, 当 $\theta = 0$ 时, 即向前差分格式.

用 Fourier 方法分析 (6.1.8) 的稳定性, 求得其增长因子为

$$G(\Delta t, \sigma) = \frac{1 - 4(1-\theta)ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}}{1 + 4\theta ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}} \tag{6.1.12}$$

由 $|G(\Delta t, \sigma)| \leqslant 1$, 得

$$-1 \leqslant \frac{1 - 4(1-\theta)ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}}{1 + 4\theta ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}} \leqslant 1 \tag{6.1.13}$$

经计算, 右边不等式对 $r \geqslant 0$ 总成立, 左边不等式要求 $2ar(1-2\theta) \leqslant 1$, 因此加权隐式格式的稳定性条件为:

$$\begin{aligned} &\text{当 } 0 \leqslant \theta < \frac{1}{2}\text{时}, \quad r \leqslant \frac{1}{2a(1-2\theta)} \\ &\text{当 } \frac{1}{2} \leqslant \theta \leqslant 1\text{时}, \quad \text{无条件稳定} \end{aligned} \tag{6.1.14}$$

所以向后差分格式和 Crank-Nicolson 格式是无条件稳定的, 而向前差分格式的稳定性条件为 $ar \leqslant \frac{1}{2}$.

§6.1.3 三层显式格式

前面已经证明二阶精度的 Richardson 格式, 即

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^{k-1}}{2\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} = 0 \tag{6.1.15}$$

是不稳定的格式, 1953 年, Du Fort 和 Frankel 对 Richardson 格式进行了如下修正

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^{k-1}}{2\Delta t} - a\frac{u_{j+1}^k - (u_j^{k+1} + u_j^{k-1}) + u_{j-1}^k}{h^2} = 0 \tag{6.1.16}$$

即用 $u_j^{k+1} + u_j^{k-1}$ 代替了 Richardson 格式中的 $2u_j^k$. 差分格式 (6.1.16) 称 **Du Fort-Frankel 格式**, 但该格式与微分方程 (6.1.1) 是条件相容的. 因 (6.1.16) 式的截断误差为

$$\begin{aligned} &\frac{u(x_j, t_k + \Delta t) - u(x_j, t_k - \Delta t)}{2\Delta t} - a\frac{u(x_j + h, t_k) - u(x_j, t_k + \Delta t) + u(x_j - h, t_k)}{h^2} \\ &= \left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^k - a\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^k + a\left(\frac{\Delta t}{h}\right)^2\left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right]_j^k + O(\Delta t^2 + h^2) + O\left(\frac{\Delta t^4}{h^2}\right) \end{aligned} \tag{6.1.17}$$

相容性要求当 $\Delta t \to 0$ 时, 有 $\frac{\Delta t}{h} \to 0$, 即差分方程 (6.1.16) 与微分方程相容的充要条件是 Δt 趋于 0 的速度要比 h 趋于 0 的速度快. 如果 $\dfrac{\Delta t}{h}$ 为常数 c, 则差分格式 (6.1.16) 与双曲型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + ac^2\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \tag{6.1.18}$$

相容.

例 1 分析 Du Fort-Frankel 格式的稳定性.

解 将三层格式 (6.1.16) 化成与其等价的二层差分格式

$$\begin{cases} (1+2ar)u_j^{k+1} = (1-2ar)v_j^k + 2ar(u_{j+1}^k + u_{j-1}^k) \\ v_j^{k+1} = u_j^k \end{cases} \tag{6.1.19}$$

其中 $r = \dfrac{\Delta t^2}{h^2}$. 令 $\boldsymbol{u} = [u, v]^T$, 则上面的方程组写可成

$$\begin{bmatrix} 1+2ar & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \boldsymbol{u}_j^{k+1} = \begin{bmatrix} 2ar & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{u}_{j-1}^k + \begin{bmatrix} 0 & 1-2ar \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{u}_j^k + \begin{bmatrix} 2ar & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \boldsymbol{u}_{j+1}^k \tag{6.1.20}$$

令 $\boldsymbol{u}_j^k = \boldsymbol{v}^k e^{\mathrm{i}\sigma jh}$(其中 $\mathrm{i}^2 = -1$) 代人上式, 得增长矩阵

$$G(\Delta t, \sigma) = \begin{bmatrix} 1+2ar & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 4ar\cos\sigma h & 1-2ar \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{2\alpha\cos\sigma h}{1+\alpha} & \dfrac{1-\alpha}{1+\alpha} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.1.21}$$

其中 $\alpha = 2ar$. $G(\Delta t, \sigma)$ 的特征方程为

$$\mu^2 - \left(\frac{2\alpha}{1+\alpha}\cos\sigma h\right)\mu - \frac{1-\alpha}{1+\alpha} = 0 \tag{6.1.22}$$

根据定理 1.5.2 知, 特征方程 (6.1.22) 的两个根 μ_1, μ_2 满足 $|\mu_i| \leqslant 1 (i=1,2)$, 所以 von Neumann 条件满足. 其根的表达式为

$$\mu_{1,2} = \frac{\alpha\cos\sigma h \pm \sqrt{1-\alpha^2\sin^2\sigma h}}{1+\alpha} \tag{6.1.23}$$

分两种情况讨论:

(1) 重根, $\mu_1 = \mu_2 = \dfrac{\alpha\cos\sigma h}{1+\alpha}$, 此时有 $|\mu_i| < 1 (i=1,2)$.

(2) 两根互异, 此时有 $|\mu_i| \leqslant 1 (i=1,2)$.

不论哪种情况, 都能使 von Neumann 条件成为充要条件, 因此, Du Fort-Frankel 格式是无条件稳定的.

§6.1.4 三层隐式格式

Richardson 和 Du Fort-Frankel 格式都是三层显格式, 现在讨论三层隐式格式. 第一个格式是

$$\frac{3}{2}\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}-\frac{1}{2}\frac{u_j^k-u_j^{k-1}}{\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0 \tag{6.1.24}$$

其截断误差为 $O(\Delta t^2+h^2)$. 事实上, (6.1.24) 式在 t 方向加权为 $\frac{3}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$. 该格式无条件稳定.

另一方面, 可以将 CN 格式 (6.1.11) 的二个时间层推广到三个时间层, 所得的隐式格式为

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^{k-1}}{2\Delta t}-a\frac{1}{3h^2}(\delta_x^2u_j^{k+1}+\delta_x^2u_j^k+\delta_x^2u_j^{k-1})=0 \tag{6.1.25}$$

其截断误差为 $O(\Delta t^2+h^2)$. 分析 (6.1.25) 的截断误差, 得到如下误差阶更高的公式

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^{k-1}}{2\Delta t}=\frac{a}{3h^2}(\delta_x^2u_j^{k+1}+\delta_x^2u_j^k+\delta_x^2u_j^{k-1})-\frac{1}{24\Delta t}(\delta_x^2u_j^{k+1}-\delta_x^2u_j^{k-1}) \tag{6.1.26}$$

该格式的截断误差为 $O(\Delta t^2+h^4)$, 其结点分布如图 6.2 所示.

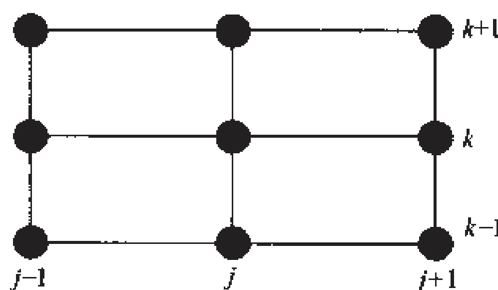


图 6.2 结点分布示意图

为讨论稳定性, 将误差格式 (6.1.25) 写成如下形式

$$\left(1-\frac{2}{3}ar\delta_x^2\right)u_j^{k+1}=\frac{2}{3}ar\delta_x^2u_j^k+\left(1+\frac{2}{3}ar\delta_x^2\right)u_j^{k-1} \tag{6.1.27}$$

并将其化为等价的两层差分格式

$$\begin{cases}\left(1-\frac{2}{3}ar\delta_x^2\right)u_j^{k+1}=\frac{2}{3}ar\delta_x^2u_j^k+\left(1+\frac{2}{3}ar\delta_x^2\right)v_j^k\\ v_j^{k+1}=u_j^k\end{cases} \tag{6.1.28}$$

求得 (6.1.28) 式的增长矩阵是

$$G(\Delta t,\sigma)=\begin{bmatrix}1+\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{\sigma h}{2} & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}-\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{\sigma h}{2} & 1-\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}-\frac{\alpha}{1+\alpha} & \frac{1-\alpha}{1+\alpha}\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{6.1.29}$$

其中 $\alpha=\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}$. G 的特征方程是

$$\mu^2+\frac{\alpha}{1+\alpha}\mu-\frac{1-\alpha}{1+\alpha}=0 \tag{6.1.30}$$

利用定理 1.5.2, 有 $|\mu_i|\leqslant 1(i=1,2)$, 从而差分格式 (6.1.25) 是无条件稳定的.

§6.1.5 跳点格式

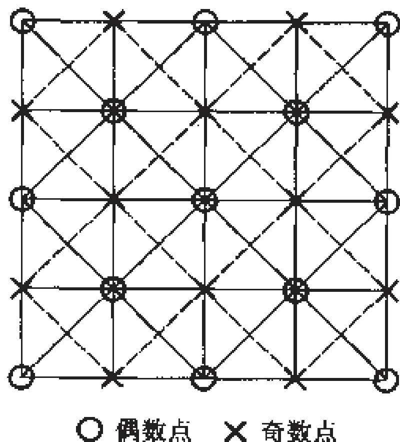
首先将网格点 (j,k) 按照 $k+j=$ 偶数和奇数分成两组网格点, 即偶数网格点和奇数网格点, 从而形成两套相交错的菱形网格. 跳点法是在这两套网格上分别进行的. 当由 t_k 时刻的值求下一时刻 t_{k+1} 的值时, 先在偶数网格点上用显式格式

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0,\quad 当k+1+j=偶数 \tag{6.1.31}$$

求得 t_{k+1} 时刻的值, 然后在奇数网格点上用隐式格式

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0,\quad 当k+1+j=奇数 \tag{6.1.32}$$

计算 u_j^{k+1}. 这时奇点 u_j^{k+1} 的左右邻点 u_{j-1}^{k+1} 和 u_{j+1}^{k+1} 都是偶数点, 已求出, 所以 (6.1.32) 式实际上是显式格式.



○ 偶数点 × 奇数点

图 6.3 跳点格式的结点分布示意图

下面考察格式 (6.1.31) 和 (6.1.32) 的精度及稳定性, 当用 (6.1.32) 式算出奇数网格点上的 u_j^{k+1} 时, 由于 $k+2+j$ 必为偶数, 因此用格式 (6.1.31)

$$\frac{u_j^{k+2}-u_j^{k+1}}{\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0 \tag{6.1.33}$$

计算, (6.1.32) 减去 (6.1.33) 得

$$u_j^{k+2}=2u_j^{k+1}-u_j^k,\quad \text{当}k+2+j=\text{偶数} \tag{6.1.34}$$

由 (6.1.34) 和 (6.1.32) 消去 u_j^{k+1}, 得

$$\frac{u_j^{k+2}-u_j^{k+1}}{\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+2}-u_j^k+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0,\quad \text{当}k+j=\text{偶数} \tag{6.1.35}$$

因此可得出, 当 $k+j=$ 偶数时, (6.1.35) 式就是 Du Front-Frankel 格式, 因此跳点法等价于 Du Fort-Frankel 格式, 所以精度和稳定性同 Du Fort-Frankel 格式.

由于 (6.1.34) 比 (6.1.32) 简单, 因此可用 (6.1.34) 式来计算偶数网格点上的值, 已知初始值 u_j^0, 先对 $k=1$ 的时间层的偶数网格点上的值使用显式公式 (6.1.31), 然后算出奇数网格点上的值, 该值不保存, 直接由 (6.1.34) 算下一时间层的 u_j^{k+2}, 该值保存后, 用于再下一时间层的计算. 因此跳点格式虽与 Du Front-Frankel 格式等价, 但节省存储和计算量.

§6.1.6 预测校正格式

考虑将向前显式和向后隐式结合. 首先用向前显式格式 (6.1.2) 计算 $k+\frac{1}{2}$ 上的值, 然后再用向后隐式格式 (6.1.4) 计算 $k+1$ 层上的值, 这两步过程可分别写成

$$\frac{u_j^{k+1/2}-u_j^k}{\Delta t/2}-a\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0 \tag{6.1.36}$$

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^{k+1/2}}{\Delta t/2}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_j^{k+1}}{h^2}=0 \tag{6.1.37}$$

该格式称为**预测校正格式**. 为分析稳定性, 将两方程相加, 得

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}=\frac{a}{2}\left[\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}+\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}\right] \tag{6.1.38}$$

该式与 CN 格式 (6.1.11) 完全相同. 式 (6.1.36) 和 (6.1.37) 的增长因子分别为 $1-2ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}$ 和 $1+2ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}$, 合成格式 (6.1.38) 的总增长因子为

$$\left[1-2ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}\right]\left[1+2ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}\right]^{-1} \tag{6.1.39}$$

上式和CN格式的增长因子一样. 因此这一组合格式是无条件稳定的, 误差阶为 $O(\Delta t^2+h^2)$.

如果先用向后隐式格式计算, 再用向前显式格式计算, 则结果为

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0 \tag{6.1.40}$$

$$\frac{u_j^{k+2}-u_j^{k+1}}{\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0 \tag{6.1.41}$$

上两式相加, 得合成格式

$$\frac{u_j^{k+2}-u_j^k}{2\Delta t}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0 \tag{6.1.42}$$

(6.1.42) 恰好是 Richardson 显式格式 (6.1.15) 中的上标 k 增加 1. Richardson 格式是完全不稳定的, 但组合后 (6.1.42) 式的增长因子是

$$\left[1-4ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}\right]\left[1+4ar\sin^2\frac{\sigma h}{2}\right]^{-1}$$

因而是无条件稳定的, 误差为 $O(\Delta t^2+h^2)$.

由上看出, 一种无条件稳定的格式和一种条件稳定的格式组成的预测—校正格式, 其结果是一种无条件稳定的格式, 而且还能达到更高的精度, 即从 $O(\Delta t+h^2)$ 提高到 $O(\Delta t^2+h^2)$.

§6.1.7 不对称格式

Saul'yev(1964) 曾介绍过方程 (6.1.1) 的一系列不对称近似格式, 这些格式都是无条件稳定的显格式. 采用如下近似

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+O(\Delta t) \tag{6.1.43}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac12}^k-\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-\frac12}^k}{h}+O(h^2) \tag{6.1.44}$$

也即对 $\frac{\partial u}{\partial t}$ 用向前差分, 对 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)$ 采用中心差分.Saul'yev 用 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-\frac12}^{k+1}$ 代替 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-\frac12}^k$, 于是 (6.1.44) 式为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac12}^k-\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-\frac12}^{k+1}}{h}+O(\Delta t+h^2) \tag{6.1.45}$$

$$=\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^k-u_j^k-u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1})+O(\Delta t+h^2) \tag{6.1.46}$$

由 (6.1.43) 和 (6.1.46) 式, 可得 (6.1.1) 的差分格式

$$u_j^{k+1}=\frac{1-ar}{1+ar}u_j^k+\frac{ar}{1+ar}(u_{j-1}^{k+1}+u_{j+1}^k) \tag{6.1.47}$$

这里 $r=\frac{\Delta t}{h^2}$. 其截断误差前三项为

$$\frac{h}{\Delta t}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}-\frac{\Delta t^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}-\frac{h^2}{12}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}$$

故误差阶为 $O\left(\Delta t^2+h^2+\frac{h}{\Delta t}\right)$ 阶. 该格式所用的网格点如图 6.4 所示. 如边界值 u_0^{k+1} 已知, 则由 (6.1.47) 式可显式地写出 $u_j^{k+1}(j=1,\cdots)$ 之值, 即计算从左边界开始逐步向右移动.

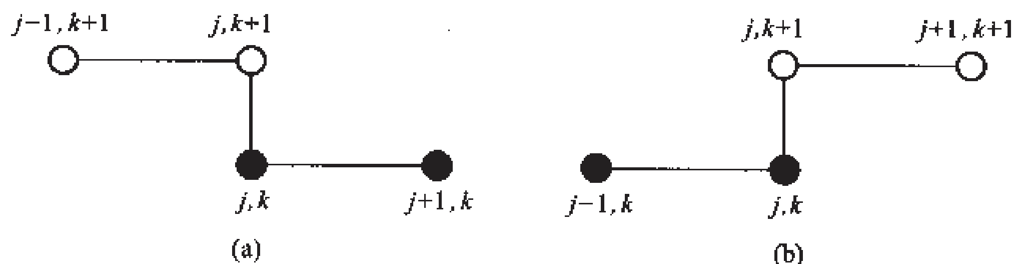


图 6.4 计算结点示意图

若在 (6.1.44) 中用 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2}}^{k+1}$ 代替 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2}}^{k}$, 则

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2}}^{k+1}-\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-\frac{1}{2}}^{k}}{h}+O(\Delta t+h^2) \tag{6.1.48}$$

$$=\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^{k+1}-u_j^{k+1}-u_j^k+u_{j-1}^k)+O(\Delta t+h^2) \tag{6.1.49}$$

于是得另一个类似的格式

$$u_j^{k+1}=\frac{1-ar}{1+ar}u_j^k+\frac{ar}{1+ar}(u_{j+1}^{k+1}+u_{j-1}^k) \tag{6.1.50}$$

其截断误差前三项为

$$-\frac{h}{\Delta t}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}-\frac{\Delta t^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}-\frac{h^2}{12}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}$$

故误差阶为 $O\left(\Delta t^2+h^2+\frac{h}{\Delta t}\right)$. 如果计算从右边界向左边界移动, 则 (6.1.50) 式也是显式格式.

如果 ar 为常数且与原方程相容, 则截断误差为 $O(\Delta t+h^2)$ 阶. Larkin(1964) 提出了使用 Saul'yev 近似格式易于使用的各种算法, 这些算法是:

1. 只使用 (6.1.47), 在时间方向上一条线一条线地进行计算, 在同一条线上始终从左到右.

2. 只使用 (6.1.50), 在同一条线上始终从右到左进行计算.

3. 交替使用 (6.1.47) 和 (6.1.50), 在某一条线上使用 (6.1.47), 在下一条线上使用 (6.1.50), 这时截断误差为 $O\left(\Delta t^2 + h^2 + \left(\frac{h}{\Delta t}\right)^2\right)$ 阶.

4. 在同一条直线上同时使用 (6.1.47) 式 (从左到右) 和 (6.1.50) 式 (从右到左), 然后把所得结果取平均值作为结果, 这种取平均值的方法可以抵消截断误差, 其计算过程可以写成

$$P_j^{k+1} = \frac{1-ar}{1+ar}u_j^k + \frac{ar}{1+ar}(P_{j-1}^{k+1} + u_{j+1}^k), \quad j = 1, \cdots, J-1 \tag{6.1.51}$$

$$Q_j^{k+1} = \frac{1-ar}{1+ar}u_j^k + \frac{ar}{1+ar}(Q_{j+1}^{k+1} + u_{j-1}^k), \quad j = 1, \cdots, J-1 \tag{6.1.52}$$

$$u_j^{k+1} = \frac{P_j^{k+1} + Q_j^{k+1}}{2} \tag{6.1.53}$$

Barakat 和 Clark(1966) 提出保留前一时刻中的 P_j^k 和 Q_j^k, 结果得到

$$P_j^{k+1} = \frac{1-ar}{1+ar}P_j^k + \frac{ar}{1+ar}(P_{j-1}^{k+1} + P_{j+1}^k), \quad j = 1, \cdots, J-1 \tag{6.1.54}$$

$$Q_j^{k+1} = \frac{1-ar}{1+ar}Q_j^k + \frac{ar}{1+ar}(Q_{j+1}^{k+1} + Q_{j-1}^k), \quad j = 1, \cdots, J-1 \tag{6.1.55}$$

$$u_j^{k+1} = \frac{P_j^{k+1} + Q_j^{k+1}}{2} \tag{6.1.56}$$

Liu(1969) 提出对 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2}}^k$ 和 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2}}^k$ 使用高阶近似, 所得的差分格式为

$$u_j^{k+1} = \frac{2-4ar}{2+3ar}u_j^k + \frac{ar}{2+3ar}(u_{j-1}^k + 3u_{j+1}^k - u_{j-2}^{k+1} + 4u_{j-1}^{k+1}) \tag{6.1.57}$$

$$u_j^{k+1} = \frac{2-4ar}{2+3ar}u_j^k + \frac{ar}{2+3ar}(u_{j+1}^k + 3u_{j-1}^k - u_{j+2}^{k+1} + 4u_{j+1}^{k+1}) \tag{6.1.58}$$

所用的网格点如图 6.5 所示.

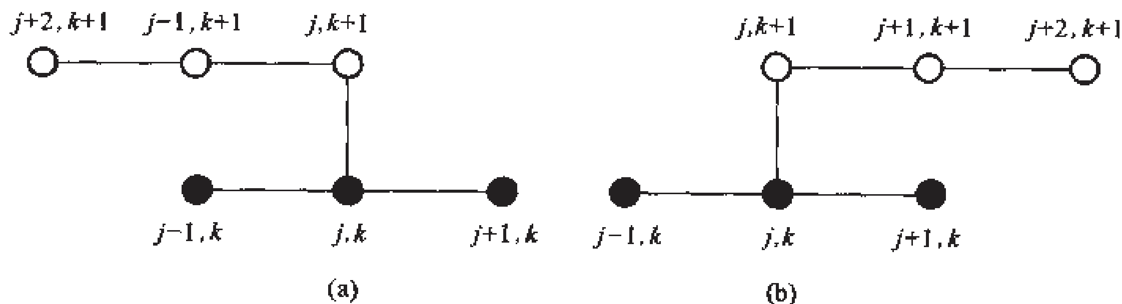


图 6.5　差分格式结点示意图

方程 (6.1.57) 和 (6.1.58) 与 Saul'yev 方法完全相似, 不同的是在任一时间上都必须用其他方法求得第一个点的值, 从而也都是显式格式, 这两种显式格式可以按 Saul'yev 格式那样任意组合后再使用.

上面每一种格式和它们的组合都是无条件稳定的. 以 (6.1.47) 式为例, 采用 von Neumann 分离变量法, 可得其增长因子为

$$G(\Delta t,\sigma)=\frac{1-ar+are^{\mathrm{i}\sigma h}}{1-ar+are^{-\mathrm{i}\sigma h}}\equiv\frac{N}{D} \tag{6.1.59}$$

(6.1.59) 式的分子 (N) 分母 (D) 都是虚数, 且虚部相等, 所以如果

$$\mathrm{Re}(D)^2-\mathrm{Re}(N)^2=4ar(1-\cos\sigma h)\geqslant 0 \tag{6.1.60}$$

则 $|G(\Delta t,\sigma)|\leqslant 1$. 由于 $ar(1-\cos\sigma h)\geqslant 0$ 恒成立 (a 恒大于 0), 所以格式 (6.1.47) 无条件稳定.

对格式 (6.1.57), 可求得其增长因子为

$$G(\Delta t,\sigma)=\frac{\left(\frac{ar}{2}-4\right)+e^{-\mathrm{i}\sigma h}+3e^{\mathrm{i}\sigma h}}{\left(\frac{ar}{2}+3\right)+e^{-2\mathrm{i}\sigma h}-4e^{\mathrm{i}\sigma h}} \tag{6.1.61}$$

可证 $|G(\Delta t,\sigma)|\leqslant 1$, 格式 (6.1.57) 是无条件稳定的.

§6.2 变系数抛物型方程

很多物理问题要用变系数的抛物型分方程来描述, 当出现变系数时, 处理方法与常系数大致相同, 下面考虑几种不同的情况.

1. 第一种形式

$$\frac{\partial u}{\partial t}=a(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{6.2.1}$$

其中 $a(x)$ 是 x 的函数且导数存在. 易知向前差分格式是

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}-a_j\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0 \tag{6.2.2}$$

精度为 $O(\Delta t+h^2)$. 该格式可以推广到高阶的形式, 例如

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^{k-1}}{2\Delta t}=\frac{a_j}{3h^2}(\delta_x^2u_j^{k+1}+\delta_x^2u_j^k+\delta_x^2u_j^{k-1})-\frac{1}{12}\frac{\delta_x^2u_j^{k+1}-\delta_x^2u_j^{k-1}}{2\Delta t} \tag{6.2.3}$$

精度是 $O(\Delta t^2+h^4)$ 阶. 上式左边第一项是对 $\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k$ 的中心差分近似, 而右边最后一项可等价地写成

$$-\frac{1}{12}\frac{\delta_x^2u_j^{k+1}-\delta_x^2u_j^{k-1}}{2\Delta t}\approx-\frac{1}{12}\delta_x^2\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k \tag{6.2.4}$$

从而可构成对空间的四阶精度近似.

2. 第二种形式

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(a(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) \tag{6.2.5}$$

若 $a(x)$ 的导数存在, 则该式等价于

$$\frac{\partial u}{\partial t}=a(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial a(x)}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x} \tag{6.2.6}$$

差分格式为

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}=a_j\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}+(a_x)_j\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h} \tag{6.2.7}$$

或

$$u_j^{k+1}=(1-2a_jr)u_j^k+a_jr(u_{j+1}^k-u_{j-1}^k)+\frac{hr(a_x)_j}{2}(u_{j+1}^k-u_{j-1}^k) \tag{6.2.8}$$

其误差阶为 $O(\Delta t+h^2)$, 这里 $a_x=\dfrac{\partial a(x)}{\partial x}$.

3. 第三种形式

$$\frac{\partial u}{\partial t}=a(x,t)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{6.2.9}$$

因

$$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t}\right) \tag{6.2.10}$$

所以

$$\left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right]_j^{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{h^2}\delta_x^2\left[\frac{1}{a_j^{k+\frac{1}{2}}}\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}\right]+\cdots \tag{6.2.11}$$

又

$$\left[\frac{1}{a}\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^{k+\frac{1}{2}}=\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\frac{\delta_x^2(u_j^{k+1}+u_j^k)}{h^2}-\frac{h^2}{12}\left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right]_j^{k+\frac{1}{2}}+\cdots \tag{6.2.12}$$

将 (6.2.11) 代入 (6.2.12) 式, 并对方程左端离散, 最终可得差分格式

$$\frac{1}{ra_j^{k+\frac{1}{2}}}(u_j^{k+1}-u_j^k)=\frac{1}{2}\delta_x^2\left(1-\frac{1}{6ra_j^{k+\frac{1}{2}}}\right)u_j^{k+1}+\frac{1}{2}\delta_x^2\left(1+\frac{1}{6ra_j^{k+\frac{1}{2}}}\right)u_j^k \tag{6.2.13}$$

其误差阶为 $O(\Delta t^2+h^4)$. 其中 $r=\dfrac{\Delta t}{h^2}$.

§6.3 非线性抛物型方程

考虑如下形式的非线性抛物型方程

$$\beta(u)\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha(u)\frac{\partial u}{\partial x}\right) \tag{6.3.1}$$

其中 $\beta(u)>0$, $\alpha(u)>0$. 可以使用 CN 格式, 但最后导致求解复杂的代数方程. 现用三层格式

$$\beta(u_j^k)(u_j^{k+1}-u_j^{k-1})=2r[\alpha(u_{j+\frac{1}{2}}^k)(u_{j+1}^k-u_j^k)-\alpha(u_{j-\frac{1}{2}}^k)(u_j^k-u_{j-1}^k)] \tag{6.3.2}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h^2}$. 上式左边是对 $\frac{\partial u}{\partial t}$ 的中心差分近似, 式中的 $\beta(u)$ 在中点求值, 右边是对 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 的中心差分. 如果分别用下式替换 u_{j+1}^k, u_j^k 和 u_{j-1}^k, 即

$$\begin{aligned}
u_{j+1}^k&=\frac{1}{3}(u_{j+1}^{k+1}+u_{j+1}^k+u_{j+1}^{k-1})\\
u_j^k&=\frac{1}{3}(u_j^{k+1}+u_j^k+u_j^{k-1})\\
u_{j-1}^k&=\frac{1}{3}(u_{j-1}^{k+1}+u_{j-1}^k+u_{j-1}^{k-1})
\end{aligned} \tag{6.3.3}$$

并令

$$\begin{aligned}
\alpha(u_{j+\frac{1}{2}}^k)&=\alpha\left(\frac{u_{j+1}^k+u_j^k}{2}\right)=\alpha_1\\
\alpha(u_{j-\frac{1}{2}}^k)&=\alpha\left(\frac{u_j^k+u_{j-1}^k}{2}\right)=\alpha_2
\end{aligned} \tag{6.3.4}$$

则最后得到如下有限差分格式

$$\begin{aligned}
\beta u_j^k(u_j^{k+1}-u_j^{k-1})=\frac{2r}{3}&\left\{\alpha_1[(u_{j+1}^{k+1}-u_j^{k+1})+(u_{j+1}^k-u_j^k)+(u_{j+1}^{k-1}-u_j^{k-1})]\right.\\
&\left.-\alpha_2[(u_j^{k+1}-u_{j-1}^{k+1})+(u_j^k-u_{j-1}^k)+(u_j^{k-1}-u_{j-1}^{k-1})]\right\}
\end{aligned} \tag{6.3.5}$$

可以证明上式稳定且收敛, 而且关于 $k+1$ 时间层上的未知数是线性的.

下面考虑更一般形式的非线性偏微分方程, 即

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\phi\left(t,x,u,\frac{\partial u}{\partial x},\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \tag{6.3.6}$$

可用下式近似

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}\approx\phi\left(k\Delta t,jh,u_j^k,\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h},\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}\right) \tag{6.3.7}$$

如果用 $u_j^k+\varepsilon_j^k$ 代替 u_j^k, 这里 ε_j^k 是由于舍入误差或线性化带来的误差, 则 (6.3.7) 可写成

$$\begin{aligned}
&\frac{(u_j^{k+1}+\varepsilon_j^{k+1})-(u_j^k+\varepsilon_j^k)}{\Delta t}\approx\phi\left[k\Delta t,jh,u_j^k+\varepsilon_j^k,\right.\\
&\frac{(u_{j+1}^k+\varepsilon_{j+1}^k)-(u_{j-1}^k+\varepsilon_{j-1}^k)}{2h},\\
&\left.\frac{(u_{j+1}^k+\varepsilon_{j+1}^k)-2(u_j^k+\varepsilon_j^k)+(u_{j-1}^k+\varepsilon_{j-1}^k)}{h^2}\right]
\end{aligned} \tag{6.3.8}$$

将上式写成

$$\frac{(u_j^{k+1}-u_j^k)+(\varepsilon_j^{k+1}-\varepsilon_j^k)}{\Delta t}\approx\phi\left(t,x,u_j^k+\varepsilon_j^k,\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}+\right.$$
$$\left.\frac{\varepsilon_{j+1}^k-\varepsilon_{j-1}^k}{2h},\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}+\frac{\varepsilon_{j+1}^k-2\varepsilon_j^k+\varepsilon_{j-1}^k}{h^2}\right) \tag{6.3.9}$$

因为

$$\varepsilon_j^k,\quad \frac{\varepsilon_{j+1}^k-\varepsilon_{j-1}^k}{2h},\quad \frac{\varepsilon_{j+1}^k-2\varepsilon_j^k+\varepsilon_{j-1}^k}{h^2} \tag{6.3.10}$$

与

$$u_j^k,\quad \frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h},\quad \frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2} \tag{6.3.11}$$

相比是小量, 所以对 (6.3.9) 式右边的 ϕ 进行 Taylor 级数展开, 得到

$$\begin{aligned}&\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+\frac{\varepsilon_j^{k+1}-\varepsilon_j^k}{\Delta t}\\&\approx\phi\left(t,x,u_j^k,\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h},\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}\right)\\&+\left.\frac{\partial\phi}{\partial u}\right|_{\alpha_1}\varepsilon_j^k+\left.\frac{\partial\phi}{\partial u_x}\right|_{\alpha_2}\frac{\varepsilon_{j+1}^k-\varepsilon_{j-1}^k}{2h}+\left.\frac{\partial\phi}{\partial u_{xx}}\right|_{\alpha_3}\frac{\varepsilon_{j+1}^k-2\varepsilon_j^k+\varepsilon_{j-1}^k}{h^2}\end{aligned} \tag{6.3.12}$$

其中

$$\alpha_1=u_j^k,\quad \alpha_2=\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h},\quad \alpha_3=\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2} \tag{6.3.13}$$

由 (6.3.12) 式减去 (6.3.7) 式得

$$\frac{\varepsilon_j^{k+1}-\varepsilon_j^k}{\Delta t}=a_0\varepsilon_j^k+a_1\frac{\varepsilon_{j+1}^k-\varepsilon_{j-1}^k}{2h}+a_2\frac{\varepsilon_{j+1}^k-2\varepsilon_j^k+\varepsilon_{j-1}^k}{h^2} \tag{6.3.14}$$

其中

$$a_0=\left.\frac{\partial\phi}{\partial u}\right|_{\alpha_1},\quad a_1=\left.\frac{\partial\phi}{\partial u_x}\right|_{\alpha_2},\quad a_2=\left.\frac{\partial\phi}{\partial u_{xx}}\right|_{\alpha_3} \tag{6.3.15}$$

重新整理, 得

$$\varepsilon_j^{k+1}=r\left(a_2+\frac{h}{2}a_1\right)\varepsilon_{j+1}^k+\left[1-2r\left(a_2-\frac{h^2}{2}a_0\right)\right]\varepsilon_j^k+r\left(a_2-\frac{h}{2}a_1\right)\varepsilon_{j-1}^k \tag{6.3.16}$$

为保证 (6.3.7) 的解稳定, 要求

$$\begin{cases}a_2>0,\ a_0\leqslant 0\\ h\leqslant\min\left(\dfrac{2a_2}{|a_1|}\right)\\ r\leqslant\min\left(\dfrac{1}{2a_2-h^2a_0}\right)\end{cases} \tag{6.3.17}$$

Douglas 和 Jones(1963) 曾用预测—校正法求解非线性偏微分方程, 对于一般拟线性抛物型偏微分方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\psi\left(t,x,u,\frac{\partial u}{\partial x},\frac{\partial u}{\partial t}\right) \tag{6.3.18}$$

其中 $\dfrac{\partial\psi}{\partial u_t}>0$, 其 CN 格式是

$$\frac{\delta_x^2 u_j^k+\delta_x^2 u_j^{k+1}}{2h^2}=\psi\left((k+\frac{1}{2})\Delta t,jh,\frac{1}{2}(u_j^k+u_j^{k+1}),\right.$$
$$\left.\frac{1}{2}(\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}+\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{2h}),\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}\right) \tag{6.3.19}$$

该式在 $k+1$ 时刻上是一组非线性方程. 可以证明, 该格式稳定且收敛. 下面的预测—校正法可以得到线性方程

预测 (P)

$$\frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_j^{k+\frac{1}{2}}=\psi\left[(k+\frac{1}{2})\Delta t,jh,u_j^k,\frac{\mu_x\delta_x^0 u_j^k}{2h},\frac{1}{\Delta t/2}(u_j^{k+1/2}-u_j^k)\right] \tag{6.3.20}$$

校正 (C)

$$\frac{1}{2h^2}[(\delta_x^2 u)_j^{k+1}+(\delta_x^2 u)_j^k]=\psi\left[(k+\frac{1}{2})\Delta t,jh,u_j^{k+\frac{1}{2}},\frac{1}{4h}\mu_x\delta_x^0(u_j^{k+1}+u_j^k),\frac{1}{\Delta t}(u_j^{k+1}-u_j^k)\right] \tag{6.3.21}$$

其中 μ_x 为平均差分算子, 即 $\mu_x(u_j^k)=\dfrac{1}{2}(u_{j+\frac{1}{2}}^k+u_{j-\frac{1}{2}}^k)$. δ_x^0 为中心差分算子, 即 $\delta_x^0 u_j^k=u_{j+\frac{1}{2}}^k-u_{j-\frac{1}{2}}^k$. δ_x^2 为二阶中心差分算子, 即 $\delta_x^2 u_j^k=u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k$. 方程 (6.3.21) 所用的 $k+\dfrac{1}{2}$ 线上的值由预测步骤 (6.3.20) 计算. 此格式收敛, 误差阶为 $O(\Delta t^2+h^2)$.

例 1 $\dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(a(u)\dfrac{\partial u}{\partial x}\right)$, 其中 $a(u)=1-bu$.

解 原方程可写成

$$\frac{\partial u}{\partial t}=(1-bu)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-b\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \tag{6.3.22}$$

根据上面的推导, 可得差分格式为 (其中 $r=\dfrac{\Delta t}{h^2}$)

$$u_j^{k+1}=u_j^k+r\left[(1-bu_j^k)(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k)-\frac{1}{4}b(u_{j+1}^k-u_{j-1}^k)^2\right] \tag{6.3.23}$$

由 (6.3.17) 式得到稳定性条件为

$$h\leqslant\min\left(\frac{1-bu}{b|u_x|}\right) \tag{6.3.24}$$

$$r\leqslant\min\left(\frac{1}{2(1-bu)+bh^2u_{xx}}\right) \tag{6.3.25}$$

§6.4 对流扩散方程

当对流和扩散都存在时, 如边界层流动, 就要考虑对流扩散方程. 考虑 Burger 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{6.4.1}$$

当对流和扩散相互平衡时, 达到一个稳态. 方程 (6.4.1) 满足边界条件

$$\begin{cases} u(0,t)=u_0 \\ u(L,t)=0 \end{cases} \tag{6.4.2}$$

的稳定精确解是

$$u(x)=u_0\bar{u}\frac{1-e^{-\bar{u}R_{eL}(1-\frac{x}{L})}}{1+e^{-\bar{u}R_{eL}(1-\frac{x}{L})}} \tag{6.4.3}$$

其中 $\bar{u}$ 满足

$$\frac{\bar{u}-1}{\bar{u}+1}=e^{-\bar{u}R_{eL}} \tag{6.4.4}$$

其中 R_{eL} 是 Reynold 数, 表示对流与扩散的比, 为 $R_{eL}=\frac{u_0L}{\nu}$. 有下面两种重要的极限情形:

(1) $R_{eL}\to 0$, 这时 $\bar{u}\approx\sqrt{\frac{2}{R_{eL}}}$ 是高粘性流动, 解是 $u(x)=u_0\left(1-\frac{x}{L}\right)$.

(2) $R_{eL}\to\infty$, 这时 $\bar{u}\to 1$ 是非粘性流动, 解是

$$\begin{cases} u(x)=u_0, \quad 0\leqslant x<L \\ u(L)=0 \end{cases} \tag{6.4.5}$$

下面我们考虑一个较简单的线性 Burger 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+c\frac{\partial u}{\partial x}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{6.4.6}$$

在该模型中, 速度 c 是常数, 相应的定常解是

$$u(x)=u_0\frac{1-e^{-R_{eL}(1-\frac{x}{L})}}{1-e^{-R_{eL}}} \tag{6.4.7}$$

其中 $R_{eL}=\frac{cL}{\nu}$.

§6.4.1 FTCS 格式

Roach(1972) 给出了方程 (6.4.6) 的时间向前空间中心 (FTCS) 的差分格式

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+c\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}=\nu\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2} \tag{6.4.8}$$

在 (j,k) 处的截断误差为

$$E_j^k = \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k + \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_j^k + O(\Delta t^2) + c\left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right]_j^k + O(h^4)$$
$$-\nu\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{h^2}{4!}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right]_j^k + O(h^4) = O(\Delta t + h^2) \tag{6.4.9}$$

因此 FTCS 格式是一个相容的时间一阶精度、空间二阶精度格式. 下面讨论稳定性, 令 $s = \frac{c\Delta t}{h}$, $r = \frac{\nu\Delta t}{h^2}$, 将形式解 $u_j^k = g^k e^{\mathrm{i}j\sigma h}$ 代入 (6.4.8), 可求得增长因子为

$$G = 1 - 2r(1 - \cos\sigma h) - \mathrm{i}s\sin\sigma h \tag{6.4.10}$$

因此

$$|G|^2 = 1 + [8r^2 - 4r + (s^2 - 4r^2)(1 + \cos\sigma h)](1 - \cos\sigma h) \tag{6.4.11}$$

若格式稳定, 则对任意 σh, $|G|^2 \leqslant 1$. 于是 (1) 若 $s^2 - 4r^2 \leqslant 0$, 则得条件 $2r \leqslant 1$. (2) 若 $s^2 - 4r^2 \geqslant 0$, 则得条件 $s^2 \leqslant 2r$. 因此

$$s^2 \leqslant 2r \leqslant 1 \tag{6.4.12}$$

若定义单元 Reynolds 数 $R_{eh} = \frac{s}{r}$, 则稳定性条件要求

$$R_{eh} \leqslant \frac{2}{s} \tag{6.4.13}$$

一个好的求解 Burger 方程的有限差分格式是格式不产生振荡. 当单元 Reynold 数满足

$$2 \leqslant R_{eh} \leqslant \frac{2}{s} \tag{6.4.14}$$

时, FTCS 格式产生振荡.

§6.4.2 单元法

Keller(1970) 对抛物型偏微分方程引进了单元 (Box) 法, 二阶导数通过一个新变量的一阶导数来计算. 考虑方程 (6.4.6), 将其改写成一阶方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + c\dfrac{\partial u}{\partial x} = \nu\dfrac{\partial v}{\partial x} \\ \dfrac{\partial u}{\partial x} = v \end{cases} \tag{6.4.15}$$

然后在每个单元 $(x_{j-1},x_j)\times(t_k,t_{k+1})$ 内使用四个单元角点上的值进行离散

$$\begin{cases}\dfrac{1}{2}(\dfrac{u_{j-1}^{k+1}-u_{j-1}^k}{\Delta t}+\dfrac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t})+\dfrac{c}{2}(\dfrac{u_j^{k+1}-u_{j-1}^{k-1}}{h}+\dfrac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}) \\ \qquad =\dfrac{\nu}{2}\left(\dfrac{v_j^{k+1}-v_{j-1}^k}{h}+\dfrac{v_j^k-v_{j-1}^k}{h}\right) \\ \dfrac{u_j^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{h}=\dfrac{1}{2}(v_{j-1}^{k+1}+v_j^{k+1})\end{cases} \tag{6.4.16}$$

该格式是隐式差分格式, 且导致一个块三对角方程组, 可以用块消元法求解. 对该简单的模型方程, 中间变量 v 可以由联立方程 (6.4.16) 消掉. 记 $\delta u_j=u_j^{k+1}-u_j^k$, 则导致一个"$\delta$ 形式"

$$\left(\frac{1}{4\Delta t}-\frac{c}{4h}-\frac{\nu}{2h^2}\right)\delta u_{j-1}+\left(\frac{1}{2\Delta t}+\frac{\nu}{h^2}\right)\delta u_j+\left(\frac{1}{4\Delta t}-\frac{c}{4h}-\frac{\nu}{2h^2}\right)\delta u_{j+1}$$
$$=-c\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}+\nu\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2} \tag{6.4.17}$$

该格式与 CN 格式的不同在于时间导数项的系数. 对均匀网格, 该格式在时间和空间方向上都是二阶精度.

§6.4.3 混合型格式

讨论无粘性 Burgers 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{u^2}{2}\right)=0 \tag{6.4.18}$$

的**混合型显式差分格式**. 该格式的特点是根据局部点的特征方向进行离散.

(1) $u_{j-\frac{1}{2}}^k>0,\ u_{j+\frac{1}{2}}^k>0$(超音速点)

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+u_{j-\frac{1}{2}}^k\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=0 \tag{6.4.19}$$

(2) $u_{j-\frac{1}{2}}^k>0,\ u_{j+\frac{1}{2}}^k<0$(激波点)

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+u_{j-\frac{1}{2}}^k\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}+u_{j+\frac{1}{2}}^k\frac{u_{j+1}^k-u_j^k}{h}=0 \tag{6.4.20}$$

(3) $u_{j-\frac{1}{2}}^k<0,\ u_{j+\frac{1}{2}}^k>0$(音速点)

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+u_j^{k+1}\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}=0 \tag{6.4.21}$$

(4) $u_{j-\frac{1}{2}}^k<0,\ u_{j+\frac{1}{2}}^k<0$(亚音速点)

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+u_{j+\frac{1}{2}}^k\frac{u_{j+1}^k-u_j^k}{h}=0 \tag{6.4.22}$$

其中中值取平均

$$u_{j-\frac{1}{2}}=\frac{u_{j-1}+u_j}{2} \tag{6.4.23}$$

该格式也易推广到粘性 Burgers 方程 (6.4.6), 只要右端项加上一个二阶中心差分格式.

下面分析格式的相容性和精度. 设 $F(u)=\frac{u^2}{2}$ 是通量函数, 格式 (6.4.19)、(6.4.20) 和 (6.4.22) 可以写成守恒的偏微分方程形式. 例如对 (6.4.20) 式, 有

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+\frac{F_j^k-F_{j-1}^k}{h}+\frac{F_{j+1}^k-F_j^k}{h}=0 \tag{6.4.24}$$

截断误差是

$$\begin{aligned}E_j^k&=\left[\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right]_j^k+O(\Delta t^2)+\left[\frac{\partial F}{\partial x}-\frac{h}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}+\frac{\partial F}{\partial x}+\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right]_j^k+O(h^2)\\&=\left[\frac{\partial u}{\partial t}+2\frac{\partial F}{\partial x}\right]_j^k+O(\Delta t+h)\end{aligned} \tag{6.4.25}$$

在激波点, (6.4.20) 式与偏微分方程不相容, 但格式 (6.4.19) 和 (6.4.22) 与方程相容, 精度为 $O(\Delta t+h)$.

对格式 (6.4.21), 因为

$$E_j^k=\Delta t\left[\frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}+\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^k+\frac{h^2}{6}u_j^k\frac{\partial^3 u_j^k}{\partial x^3}+O(\Delta t^2+\Delta t h^2+h^4)=O(\Delta t+h^2) \tag{6.4.26}$$

显然, 时间是一阶, 空间是二阶, 然而, 它不守恒, 但当网格步长趋于零时, 守恒误差趋于零.

在使用 von Neumann 方法分析稳定性之前必须线性化, 考虑包括格式 (6.4.19) 和 (6.4.22) 的激波点格式 (6.4.24), 其线性化格式为

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+(u_{j-1}^k+u_{j+1}^k)\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}=0 \tag{6.4.27}$$

采用冻结系数法, 设 $c=u_{j-1}^k+u_{j+1}^k$. 激波区域的一个重要特征是特征波速 $u_{j\pm\frac{1}{2}}^k$ 符号的改变, 解释这一特征的线性化格式为

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\Delta t}+c^+\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}+c^-\frac{u_{j+1}^k-u_j^k}{h}=0 \tag{6.4.28}$$

其中 $c^+=u_{j-\frac{1}{2}}^k>0$ 和 $c^-=u_{j+\frac{1}{2}}^k<0$. 现在, 用 von Neumann 方法分析稳定性, 将 $u_j^k=g^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}j\sigma h}$ 代入, 得增长因子

$$\begin{aligned}G&=1-s^+(1-e^{-\mathrm{i}\sigma h})+s^-(e^{\mathrm{i}\sigma h}-1)\\&=1-(s^{-1}+s^+)(1-\cos\sigma h)+\mathrm{i}(s^{-1}-s^+)\sin\sigma h\end{aligned} \tag{6.4.29}$$

其中 $s^+ = c^+\left(\frac{\Delta t}{h}\right) > 0$, $s^- = -c^-\left(\frac{\Delta t}{h}\right) > 0$. 由于 $|G|^2 \leqslant 1$ 等价于

$$(s^{-1} + s^+)[1 - (s^{-1} + s^+)] \geqslant 0 \tag{6.4.30}$$

所以稳定条件是

$$s^{-1} + s^+ \leqslant 1 \tag{6.4.31}$$

也即

$$\Delta t \leqslant \frac{h}{u^k_{j-\frac{1}{2}} - u^k_{j+\frac{1}{2}}} \tag{6.4.32}$$

此即 (6.4.20) 式的稳定性条件, 由此立即得 (6.4.19) 式和 (6.4.22) 式的稳定性条件, 分别为

$$\Delta t \leqslant \frac{h}{u^k_{j-\frac{1}{2}}} \tag{6.4.33}$$

和

$$\Delta t \leqslant -\frac{h}{u^k_{j+\frac{1}{2}}} \tag{6.4.34}$$

对格式 (6.4.21), 记 $\Delta = \Delta t\frac{u^k_{j+1} - u^k_{j-1}}{2h} \geqslant 0$, 可求得增长因子为

$$G = \frac{1}{1 + \Delta t} \leqslant 1 \tag{6.4.35}$$

因此格式 (6.4.21) 是无条件稳定的格式.

若格式 (6.4.19)~(6.4.22) 中的空间导数可用隐式差分来代替, 则相应地得到**混合型隐式格式**

(1) $u^k_{j-\frac{1}{2}} > 0$, $u^k_{j+\frac{1}{2}} > 0$(超音速点)

$$\frac{u^{k+1}_j - u^k_j}{\Delta t} + u^k_{j-\frac{1}{2}}\frac{u^{k+1}_j - u^{k+1}_{j-1}}{\Delta x} = 0 \tag{6.4.36}$$

(2) $u^k_{j-\frac{1}{2}} > 0$, $u^k_{j+\frac{1}{2}} < 0$(激波点)

$$\frac{u^{k+1}_j - u^k_j}{\Delta t} + u^k_{j-\frac{1}{2}}\frac{u^{k+1}_j - u^{k+1}_{j-1}}{h} + u^k_{j+\frac{1}{2}}\frac{u^{k+1}_{j+1} - u^{k+1}_j}{h} = 0 \tag{6.4.37}$$

(3) $u^k_{j-\frac{1}{2}} < 0$, $u^k_{j+\frac{1}{2}} > 0$(音速点)

$$\frac{u^{k+1}_j - u^k_j}{\Delta t} + u^{k+1}_j\frac{u^{k+1}_{j+1} - u^{k+1}_{j-1}}{2h} = 0 \tag{6.4.38}$$

(4) $u^k_{j-\frac{1}{2}} < 0$, $u^k_{j+\frac{1}{2}} < 0$(亚音速点)

$$\frac{u^{k+1}_j - u^k_j}{\Delta t} + u^k_{j+\frac{1}{2}}\frac{u^k_{j+1} - u^{k+1}_j}{h} = 0 \tag{6.4.39}$$

可以证明, 格式 (6.4.36)~ (6.4.39) 是主对角占优的, 从而是无条件稳定的.

§6.5 二维热传导方程

现讨论二维热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2},\quad (x,y)\in\Omega \tag{6.5.1}$$

的各种差分格式, 其中 $\Omega=\{(x,y)|0<x,y<1\}$. 显然, 对方程 (6.5.1) 还须附加初始条件和边界条件. 为了便于计算, 将 x 和 y 方向上取成等步长,$\Delta x=\Delta y=h$.

§6.5.1 加权差分格式

显然, 关于 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 和 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ 的显式和隐式近似有多种表达式, 它们都可以通过加权隐式公式得到. 方程 (6.5.1) 的加权差分格式是

$$\begin{aligned}\frac{u_{i,j}^{k+1}-u_{i,j}^k}{\Delta t}=&\frac{\theta_1}{h^2}(u_{i+1,j}^{k+1}-2u_{i,j}^{k+1}+u_{i-1,j}^{k+1})+\frac{1-\theta_1}{h^2}(u_{i+1,j}^k-2u_{i,j}^k+u_{i-1,j}^k)\\&+\frac{\theta_2}{h^2}(u_{i,j+1}^{k+1}-2u_{i,j}^{k+1}+u_{i,j-1}^{k+1})+\frac{1-\theta_2}{h^2}(u_{i,j+1}^k-2u_{i,j}^k+u_{i,j-1}^k)\end{aligned} \tag{6.5.2}$$

其中 $0\leqslant\theta_1\leqslant 1, 0\leqslant\theta_2\leqslant 1$. 若取 $\theta_1=\theta_2=0$, 就得显式差分格式

$$u_{i,j}^{k+1}=u_{i,j}^k+r(u_{i+1,j}^k+u_{i-1,j}^k+u_{i,j+1}^k+u_{i,j-1}^k-4u_{i,j}^k) \tag{6.5.3}$$

其中 $r=\dfrac{\Delta t}{h^2}$. 易知格式 (6.5.3) 的局部截断误差为 $O(\Delta t+h^2)$. 在已知 $k=0$ 的初始条件下, 就可以沿着 t 方向递推计算. 利用 von Neumann 方法可以得到格式 (6.5.3) 的增长因子为

$$G=1-4r\left(\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}+\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}\right) \tag{6.5.4}$$

由 $|G|\leqslant 1$ 求得稳定性条件为

$$r\leqslant\frac{1}{2\left(\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}+\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}\right)}\leqslant\frac{1}{4} \tag{6.5.5}$$

若不是等步长, 则稳定性条件变为

$$r\leqslant\frac{1}{2\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)} \tag{6.5.6}$$

格式 (6.5.3) 在 $x-y$ 平面上用到了四个点. 增加网格点数可以放宽稳定性条件. 可

以构造如下九个点的差分格式

$$\begin{aligned}u_{i,j}^{k+1} &= u_{i,j}^k + r(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j}^k + r^2\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}^k\\ &= u_{i,j}^k + r(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k - 4u_{i,j}^k)\\ &\quad + r^2[(u_{i+1,j+1}^k - 2u_{i,j+1}^k + u_{i-1,j+1}^k) - 2(u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k)\\ &\quad + (u_{i+1,j-1}^k - 2u_{i,j-1}^k + u_{i-1,j-1}^k)]\end{aligned} \tag{6.5.7}$$

其稳定性条件为 $r\leqslant \frac{1}{2}$. 截断误差仍为 $O(\Delta t+h^2)$. 若取 $r=\frac{1}{6}$, 则精度为 $O(\Delta t^2+h^2)$. 格式 (6.5.3) 和 (6.5.7) 均为显式格式, 但由于都是条件稳定, 在实际问题中很少使用, 下面将 Saul'yev 和 Du Fort-Frankel 格式加以推广.

§6.5.2 Saul'yev 不对称格式

二维 Saul'yev 近似的基本思想是对 u_{xx} 和 u_{yy} 的替换, 仿照 (6.1.46) 式和 (6.5.2) 式可以得到

$$\begin{aligned}\frac{u_{i,j}^{k+1}-u_{i,j}^k}{\Delta t} &= \frac{\theta_1}{h^2}(u_{i-1,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k + u_{i+1,j}^k)\\ &\quad + \frac{1-\theta_1}{h^2}(u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k) + \frac{\theta_2}{h^2}(u_{i,j-1}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k + u_{i,j+1}^k)\\ &\quad + \frac{1-\theta_2}{h^2}(u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k)\end{aligned} \tag{6.5.8}$$

显然当 $\theta_1=\theta_2=0$ 时, 上式即是 (6.5.3) 式. 将 (6.5.8) 式重新整理成

$$\begin{aligned}u_{i,j}^{k+1} &= \frac{r}{1+(\theta_1+\theta_2)r}[\theta_1 u_{i-1,j}^{k+1} + \theta_2 u_{i,j-1}^{k+1} + (1-\theta_1)u_{i-1,j}^k\\ &\quad + (1-\theta_2)u_{i,j-1}^k + u_{i+1,j}^k + u_{i,j+1}^k - \left(4-\theta_1-\theta_2-\frac{1}{r}\right)u_{i,j}^k]\end{aligned} \tag{6.5.9}$$

因为 (6.5.9) 式右端有 $u_{i-1,j}^{k+1}$ 和 $u_{i,j-1}^{k+1}$, 所以形式上是隐式, 但如果计算从网格空间的左上角开始并沿一条线向右推进, 则唯一的未知数是 $u_{i,j}^{k+1}$. 因为 $u_{i-1,j}^{k+1}$ 和 $u_{i,j-1}^{k+1}$ 是初始边界值, 已预先算出, 所以计算过程中只有一个未知数 $u_{i,j}^{k+1}$, 这是一种显式算法. 类似地, 仿照 (6.1.50) 式和 (6.5.2) 式可以写出

$$\begin{aligned}u_{i,j}^{k+1} &= \frac{r}{1+r(\theta_1+\theta_2)}[\theta_1 u_{i+1,j}^{k+1} + \theta_2 u_{i,j+1}^{k+1} + (1-\theta_1)u_{i+1,j}^k\\ &\quad + (1-\theta_2)u_{i,j+1}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j-1}^k - \left(4-\theta_1-\theta_2-\frac{1}{r}\right)u_{i,j}^k]\end{aligned} \tag{6.5.10}$$

该格式是从网格空间的右下角开始沿线向左计算, 也是显式格式. 另外, 与一维情形类似, 还可以将 (6.5.9) 式和 (6.5.10) 式组合在一起取平均值. (6.5.9) 式和 (6.5.10) 式的局部截断误差为 $O(\theta_1 h+\theta_2 h+\Delta t+h^2)$, 组合后的稳定性条件为

$$r\leqslant \frac{1}{2(2-\theta_1-\theta_2)} \tag{6.5.11}$$

当 $\theta_1 = \theta_2 = 0$ 时, 上式变成 (6.5.5) 式.

§6.5.3 Du Fort-Frankel 格式

一维 Du Fort-Frankel 方法可推广到二维, 首先写出二维 Richardson 显式格式

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k-1}}{2\Delta t} = \frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{h^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{h^2} \tag{6.5.12}$$

与一维一样, 该格式是无条件不稳定格式. 作如下替换

$$u_{i,j}^k = \frac{1}{2}(u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j}^{k-1}) \tag{6.5.13}$$

得

$$u_{i,j}^{k+1} = \frac{2r}{1+4r}(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k) + \frac{1-4r}{1+4r}u_{i,j}^{k-1} \tag{6.5.14}$$

该式是显式格式, 而且无条件稳定, 截断误差阶为 $O\left(\Delta t^2 + h^2 + \frac{\Delta t^2}{h^2}\right)$. 计算时, 需要已知两个时间层上的值, 其中 $k = 0$ 上的值由初始条件给出, $k = 1$ 上的值由前面其他公式或 $r = \frac{1}{4}$ 时的 (6.5.14) 式来计算. 该格式的优点是显式且绝对稳定, 但若 $\frac{\Delta t}{h}$ 保持为 $O(1)$, 则与 (6.5.14) 式相容的方程是

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{2h^2}{\Delta t^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \tag{6.5.15}$$

而不是 (6.5.1) 式.

格式 (6.1.54) 和 (6.1.55) 也可推广到二维, 为

$$\frac{P_{i,j}^{k+1} - P_{i,j}^k}{\Delta t} = \frac{P_{i+1,j}^k - P_{i,j}^k - P_{i,j}^{k+1} + P_{i-1,j}^{k+1}}{h^2} + \frac{P_{i,j+1}^k - P_{i,j}^k - P_{i,j}^{k+1} + P_{i,j-1}^{k+1}}{h^2} \tag{6.5.16}$$

$$\frac{Q_{i,j}^{k+1} - Q_{i,j}^k}{\Delta t} = \frac{Q_{i+1j}^{k+1} - Q_{i,j}^{k+1} - Q_{i,j}^k + Q_{i-1,j}^k}{h^2} + \frac{Q_{i,j+1}^{k+1} - Q_{i,j}^{k+1} - Q_{i,j}^k + Q_{i,j-1}^k}{h^2} \tag{6.5.17}$$

$u_{i,j}^{k+1}$ 值由 $P_{i,j}^{k+1}$ 和 $Q_{i,j}^{k+1}$ 的平均值计算

$$u_{i,j}^{k+1} = \frac{P_{i,j}^{k+1} + P_{i,j}^{k+1}}{2} \tag{6.5.18}$$

$P_{i,j}^{k+1}$ 和 $Q_{i,j}^{k+1}$ 均可显式计算, 其中 $P_{i,j}^{k+1}$ 按从左至右的方向计算, $Q_{i,j}^{k+1}$ 按从右至左的方向计算. 格式 (6.5.16)~(6.5.18) 不仅无条件稳定, 局部截断误差阶为 $O(\Delta t^2 + h^2)$, 而且与原方程相容.

§6.5.4 交替方向显 (ADE) 格式

上面我们已经推导了大部分显式近似格式, 我们先考虑 (6.5.9) 式和 (6.5.10) 式, 如果令 $\theta_1=\theta_2=1$(由 (6.5.11) 式知此时无条件稳定), 但在 $2k\to 2k+1$ 网格平面上写出 (6.5.9) 而在 $2k+1\to 2k+2$ 网格平面上写出 (6.5.10), 结果为

$$u_{i,j}^{2k+1}=\frac{r}{1+2r}[u_{i-1,j}^{2k+1}+u_{i,j-1}^{2k+1}+u_{i+1,j}^{2k}+u_{i,j+1}^{2k}]+\frac{1-2r}{1+2r}u_{i,j}^{2k} \tag{6.5.19}$$

$$u_{i,j}^{2k+2}=\frac{r}{1+2r}[u_{i+1,j}^{2k+2}+u_{i,j+1}^{2k+2}+u_{i-1,j}^{2k+1}+u_{i,j-1}^{2k+1}]+\frac{1-2r}{1+2r}u_{i,j}^{2k+1} \tag{6.5.20}$$

由 (6.5.19) 式从二维网格的左下至右上进行扫描, 然后由 (6.5.20) 式从右上至左下进行扫描, 其中 $u_{i,j}^{2k+1}$ 是中间解, 两层扫描后可以直接算出 $u_{i,j}^{2k+2}$. 另外, 还可以由 (6.5.19) 式从 $k\to k+\frac{1}{2}$ 计算, 再用 (6.5.20) 式从 $k+\frac{1}{2}\to k+1$ 进行计算.

§6.5.5 交替方向隐 (ADI) 格式

如果在加权差分格式 (6.5.2) 中取 $\theta_1=\theta_2=\frac{1}{2}$, 则得到 CN 格式, 可以写成

$$\left(I-\frac{r}{2}\delta_x^2-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k+1}=\left(I+\frac{r}{2}\delta_x^2+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k} \tag{6.5.21}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h^2}$. 该式是二阶精度无条件稳定的, 但需要求解一个五对角线性方程组, 当 n 很大时, 计算上不实用. Peaceman 和 Rachford(1956) 首先提出一种分裂格式, 称为**PR 格式**. 将方程 (6.5.21) 两端加上

$$\frac{r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2(u_{i,j}^k-u_{i,j}^{k+1})$$

得到

$$\left(I-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\left(I-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k+1}=\left(I+\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\left(I+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k} \tag{6.5.22}$$

然后按下面两步计算

$$\left(I-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\left(I+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k} \tag{6.5.23}$$

$$\left(I-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k+1}=\left(I+\frac{r}{2}\delta_x^2\right)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.24}$$

即第一步是沿 x 方向利用 Thomas 算法逐行求解三对角方程, 得到 $u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}$, 然后沿 y 方向逐列求解三对角方程得到解 $u_{i,j}^{k+1}$, 由于每步只需求解一组三对角方程, 且两个方向交替变换, 故通称这类格式为交替方向隐格式. 可以验证, 由 (6.5.23)~(6.5.24) 消取中间变量 $u^{k+\frac{1}{2}}$ 即得 (6.5.22). 实际上, 将 (6.5.23) 加上 (6.5.24) 得

$$u_{i,j}^{k+1}-u_{i,j}^{k}=r\delta_x^2u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}+\frac{r}{2}\delta_y^2(u_{i,j}^{k+1}+u_{i,j}^{k}) \tag{6.5.25}$$

再将 (6.5.23) 减取 (6.5.24) 得

$$2u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} = (u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j}^{k}) - \frac{r}{2}\delta_y^2(u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k}) \tag{6.5.26}$$

将 (6.5.26) 代入 (6.5.25) 得

$$\left(1 + \frac{r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2\right)(u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k}) = \frac{r}{2}(\delta_x^2 + \delta_y^2)(u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j}^{k}) \tag{6.5.27}$$

此即 (6.5.22) 式.

可用 von Neumann 法分析 PR 格式的稳定性, 其中第一式的放大因子为

$$G_a(\Delta t, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{1 - 2r\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}}{1 + 2r\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}} \tag{6.5.28}$$

第二式的放大因子为

$$G_b(\Delta t, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{1 - 2r\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}}{1 + 2r\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}} \tag{6.5.29}$$

显然两个因子都有一个有限的稳定界限, 即每个方程单独使用时都是条件稳定的, 但组合后的放大因子 $G_{PR} = G_a \cdot G_b$ 满足 $|G_{PR}| \leqslant 1$, 因此 PR 格式无条件稳定的.

Douglas 和 Rachford(1956) 曾提出如下的分裂格式, 称为 **DR 格式**

$$(I - r\delta_x^2)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} = (I + r\delta_y^2)u_{i,j}^{k} \tag{6.5.30}$$

$$(I - \frac{r}{2}\delta_y^2)u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} - r\delta_x^2 u_{i,j}^{k} \tag{6.5.31}$$

消去 $u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}$, 得到

$$(I - r\delta_x^2)(I - r\delta_y^2)u_{i,j}^{k+1} = (I + r^2\delta_x^2\delta_y^2)u_{i,j}^{k} \tag{6.5.32}$$

局部截断误差为 $O(\Delta t + h^2)$, 增长因子为

$$G_{DR} = \frac{1 + 16r^2\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}}{\left(1 + 4r\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}\right)\left(1 + 4r\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}\right)} \tag{6.5.33}$$

由于 $|G_{DR}| \leqslant 1$, 所以 DR 格式是无条件稳定的.

Дбяконов(1963) 对 CN 格式提出如下的计算步骤, 称为**D1 格式**

$$\left(I - \frac{r}{2}\delta_x^2\right)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} = \left(I + \frac{r}{2}\delta_x^2\right)\left(I + \frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k} \tag{6.5.34}$$

$$\left(I - \frac{r}{2}\delta_x^2\right)u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.35}$$

对消去中间变量后的 DR 格式 (6.5.32), 也可以按 Дьяконов 的方式分裂, 称为**D3 格式**

$$(I-r\delta_x^2)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=(I+r^2\delta_x^2\delta_y^2)u_{i,j}^k \tag{6.5.36}$$

$$(I-r\delta_y^2)u_{i,j}^{k+1}=u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.37}$$

Mitchell 和 Fairweather(1964) 推导了一种高精度的 ADI 格式, 称为**MF 格式**

$$\left[I-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\left[I+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{2}\right)\delta_y^2\right]u_{i,j}^k \tag{6.5.38}$$

$$\left[I-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u_{i,j}^{k+1}=\left[I+\frac{1}{2}v\left(r+\frac{1}{2}\right)\delta_x^2\right]u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.39}$$

该格式的增长因子为

$$G_{MF}=\frac{\left[2\left(r+\frac{1}{6}\right)\sin^2\left(\frac{\sigma_2 h}{2}\right)-1\right]\left[2\left(r+\frac{1}{6}\right)\sin^2\left(\frac{\sigma_1 h}{2}\right)-1\right]}{\left[2\left(r-\frac{1}{6}\right)\sin^2\left(\frac{\sigma_2 h}{2}\right)+1\right]\left[2\left(r-\frac{1}{6}\right)\sin^2\left(\frac{\sigma_1 h}{2}\right)+1\right]} \tag{6.5.40}$$

由于 $|G_{MF}|\leqslant 1$ 对所有 r 成立, 故 MF 格式无条件稳定, 虽然 MF 格式中单个的分裂格式并不与原偏微分方程相容, 但消去中间变量后, 得

$$\begin{aligned}&\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u_{i,j}^{k+1}\\&=\left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]\left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u_{i,j}^k\end{aligned} \tag{6.5.41}$$

从而可证明与原方程相容, 局部截断误差阶为 $O(\Delta t^2+h^4)$, 截断误差的首项是

$$\frac{r-\left(r^2-\frac{1}{20}\right)}{10\left(r+\frac{5}{6}\right)^2}h^6\left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}+\frac{\partial^6 u}{\partial y^6}\right) \tag{6.5.42}$$

由上式知, 若取 $r=\frac{1}{2\sqrt{5}}$, 则可使 MF 格式精确到 $O(\Delta t^2+h^6)$.

Дьяконов提出一个与 MF 格式等价的分裂格式, 称为**D2 格式**

$$\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]\left[1+\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u_{i,j}^k \tag{6.5.43}$$

$$\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u_{i,j}^{k+1}=u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.44}$$

Douglas(1962) 提出过一种精确的高阶方法, 这种方法可看作是对 CN 格式扰动的结果, 格式为

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\tilde{u}_{i,j}^{k+1}=\left[\left(1+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)+r\delta_y^2\right]u_{i,j}^k \tag{6.5.45}$$

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k+1}=\tilde{u}_{i,j}^{k+1}-\frac{r}{2}\delta_y^2u_{i,j}^k \tag{6.5.46}$$

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)(u_{i,j}^{k+1}-u_{i,j}^k)=r(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{i,j}^k \tag{6.5.47}$$

该格式的截断误差为 $O(\Delta t^2+h^2)$, 而且无条件稳定.

下面讨论 PR 格式 (6.5.23)~(6.5.24) 中间变量的计算. 对第二式 (6.5.24), 只要假定 $u_{i,0}^{k+1}$ 和 $u_{i,M}^{k+1}$ 的值已知即可, 其中 $j=0$ 和 $j=M$ 表示边界点, 但在第一式 (6.5.23) 中, 必须给出 $u_{0,j}^{k+\frac{1}{2}}$ 和 $u_{M,j}^{k+\frac{1}{2}}$ 的值. 为此将 (6.5.23) 式减去 (6.5.24) 式, 消去 $\frac{1}{2}r\delta_x^2u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}$ 项, 再假定边界条件 $u|_{\partial\Omega}=\psi(x,y,t)$, 得中间变量的边界值为

$$u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\left(1+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)\psi_{i,j}^k+\frac{1}{2}\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)\psi_{i,j}^{k+1},\quad (i,j)\in\partial\Omega \tag{6.5.48}$$

可以用上式来计算中间变量的边界值.

类似地可推导 DR 格式的中间变量边界值的计算公式, 为

$$u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=r\delta_y^2\psi_{i,j}^k+(1-r\delta^2y)\psi_{i,j}^{k+1},\quad (i,j)\in\partial\Omega \tag{6.5.49}$$

和 MF 格式的中间变量边界值计算公式

$$u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\frac{r+\frac{1}{2}}{2r}\left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]\psi_{i,j}^k+\frac{r-\frac{1}{6}}{2r}\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]\psi_{i,j}^{k+1},\quad (x,y)\in\partial\Omega \tag{6.5.50}$$

对 D_1、D_2 格式和 D_3 格式, $u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}$ 的计算公式分别为

$$u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\psi_{i,j}^{k+1},\quad (i,j)\in\partial\Omega \tag{6.5.51}$$

$$u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\left[1-\frac{r}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]\psi_{i,j}^{k+1},\quad (i,j)\in\partial\Omega \tag{6.5.52}$$

$$u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=(1-r\delta_y^2)\psi_{i,j}^{k+1},\quad (i,j)\in\partial\Omega \tag{6.5.53}$$

由上可知, 中间变量的边界值是通过 k 及 $k+1$ 时间层上的边界值来求得的 $D1$、$D2$ 和 $D3$ 格式确定中间变量的边界条件时比其他格式要简单. 当应用 ADI 方法计算时, 每一步都要先算出中间变量的边界值, 然后才开始内结点的计算.

上面的所有格式对 x 和 y 坐标轴上的矩形域严格成立, 如果求解的不是矩形域, 则分裂形式的格式和组合后的格式不一定等价. 然而, 实际的计算表明, 即使在非矩形的情况下, ADI 方法也能很好地应用. 此外, ADI 方法还可以类似地推广到有混合导数和具有变系数的抛物型偏微分方程. 对于有源项的抛物型方程, 如

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2u}{\partial y^2}+S(u,t,x,y) \tag{6.5.54}$$

也可处理, 对应的 PR 格式是

$$(1-\frac{r}{2}\delta_x^2)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=(1+\frac{r}{2}\delta_y^2)u_{i,j}^k+\frac{r}{2}S_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.55}$$

$$(1-\frac{r}{2}\delta_y^2)u_{i,j}^{k+1}=(1+\frac{r}{2}\delta_x^2)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}+\frac{r}{2}S_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.56}$$

DR 格式是

$$(1-r\delta_x^2)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=(1+r\delta_y^2)u_{i,j}^k+rS_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.57}$$

$$(1-r\delta_y^2)u_{i,j}^{k+1}=u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}-r\delta_y^2u_{i,j}^k \tag{6.5.58}$$

如果 S 是非线性的, 则所得结果是一组非线性代数方程组, 可以将非线性形式线性化后用迭代法求解.

§6.5.6 局部一维 (LOD) 法

对二维热传导方程 (6.5.1), **局部一维化 (LOD) 法**相当于求解

$$\frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\quad t\in[t^k,t^{k+\frac{1}{2}}] \tag{6.5.59}$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial y^2},\quad t\in[t^{k+\frac{1}{2}},t^{k+1}] \tag{6.5.60}$$

(6.5.59)~(6.5.60) 式都只含有一个空间变量 (x 和 y), 因此可用 LOD 方法来近似每个方程. 如用显式格式

$$\frac{1}{2}\frac{u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}-u_{i,j}^k}{\Delta t/2}=\frac{\delta_x^2u_{i,j}^k}{h^2} \tag{6.5.61}$$

$$\frac{1}{2}\frac{u_{i,j}^{k+1}-u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2}=\frac{\delta_y^2u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{h^2} \tag{6.5.62}$$

即

$$\begin{aligned}u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}&=(1+r\delta_x^2)u_{i,j}^k\\ u_{i,j}^{k+1}&=(1+r\delta_y^2)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{6.5.63}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h^2}$. 通常用无条件稳定的 CN 格式近似 (6.5.59)~(6.5.60) 式, 为

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\left(1+\frac{r}{2}\delta_x^2\right)u_{i,j}^k \tag{6.5.64}$$

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k+1}=\left(1+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.65}$$

若 δ_x^2 和 δ_y^2 可以互易 (即 (x,y) 的区域是矩形区域), 则又回到了 PR 格式, 即 (6.5.23) ~(6.5.24) 式. 实际上, 可以先从 PR 格式出发, 通过交换右端项 $\left(1+\frac{r}{2}\delta_x^2\right)$ 和 $\left(1+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)$ 而得到 LOD 格式 (6.5.64)~(6.5.65), 该式对应三对角方程组, 且无条件稳定, 精度为 $O(\Delta t^2+h^2)$.

类似地, 对应于 MF 格式 (6.5.38)~(6.5.39), LOD 格式为

$$\left[1-\frac{r}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}=\left[1+\frac{r}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]u_{i,j}^k \tag{6.5.66}$$

$$\left[1-\frac{r}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u_{i,j}^{k+1}=\left[1+\frac{r}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right)u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.5.67}$$

同样, 只有当 δ_x^2 和 δ_y^2 可以互易时, MF 格式与 LOD 格式才等价. 对于矩形区域, LOD 格式的中间变量 $u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}$ 的边界值可取为

$$u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} = \psi_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}, \quad (i,j) \in \partial\Omega \tag{6.5.68}$$

§6.6 三维热传导方程

考虑三维热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (x,y,z) \in \Omega, \quad t \in [0,T] \tag{6.6.1}$$

假定边界条件为 $u|_{\partial\Omega} = \psi(x,y,z,t)$, Ω 为正方形区域.

方程 (6.6.1) 的 PR 格式是 (省略 u 的下标)

$$\frac{u^{k+\frac{1}{3}} - u^k}{\Delta t} = \frac{1}{3h^2}(\delta_x^2 u^{k+\frac{1}{2}} + \delta_y^2 u^k + \delta_z^2 u^k) \tag{6.6.2}$$

$$\frac{u^{k+\frac{2}{3}} - u^{k+\frac{1}{3}}}{\Delta t} = \frac{1}{3h^2}(\delta_x^2 u^{k+\frac{1}{3}} + \delta_y^2 u^{k+\frac{2}{3}} + \delta_z^2 u^{k+\frac{1}{3}}) \tag{6.6.3}$$

$$\frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{2}{3}}}{\Delta t} = \frac{1}{3h^2}(\delta_x^2 u^{k+\frac{2}{3}} + \delta_y^2 u^{k+\frac{2}{3}} + \delta_z^2 u^{k+1}) \tag{6.6.4}$$

该格式是条件稳定的. 实际上, 上面三式的增长因子分别为

$$\begin{cases} G_a = \dfrac{1 - \dfrac{1}{3}(a_2 + a_3)}{1 + \dfrac{1}{3}a_1} \\ G_b = \dfrac{1 - \dfrac{1}{3}(a_1 + a_3)}{1 + \dfrac{1}{3}a_2} \\ G_c = \dfrac{1 - \dfrac{1}{3}(a_1 + a_2)}{1 + \dfrac{1}{3}a_3} \end{cases} \tag{6.6.5}$$

组合后的增长因子为

$$G_{PR} = G_a G_b G_c = \frac{\left[1 - \dfrac{1}{3}(a_2 + a_3)\right]\left[1 - \dfrac{1}{3}(a_1 + a_3)\right]\left[1 - \dfrac{1}{3}(a_1 + a_2)\right]}{\left(1 + \dfrac{1}{3}a_1\right)\left(1 + \dfrac{1}{3}a_2\right)\left(1 + \dfrac{1}{3}a_3\right)} \tag{6.6.6}$$

其中

$$a_i = 4r\sin^2\frac{\sigma_i h}{2}, \quad i = 1,2,3 \tag{6.6.7}$$

由 $|G_{PR}| \leqslant 1$ 可知, 存在一个有限的稳定性界限. 可见, 二维无条件稳定的 PR 格式推广到三维是条件稳定的.

Douglas 和 Rachford 提出的下面三维 DR 格式是无条件稳定的

$$(1-r\delta_x^2)u^{k+\frac{1}{3}} = [1+r(\delta_y^2+\delta_z^2)]u^k \tag{6.6.8}$$

$$(1-r\delta_y^2)u^{k+\frac{2}{3}} = u^{k+\frac{1}{3}} - r\delta_y^2 u^k \tag{6.6.9}$$

$$(1-r\delta_z^2)u^{k+1} = u^{k+\frac{2}{3}} - r\delta_z^2 u^k \tag{6.6.10}$$

消去中间变量 $u^{k+\frac{1}{3}}$ 和 $u^{k+\frac{2}{3}}$, 得

$$(1-r\delta_x^2)(1-r\delta_y^2)(1-r\delta_z^2)u^{k+1} = [1+r(\delta_x^2\delta_y^2+\delta_y^2\delta_z^2+\delta_x^2\delta_z^2) - r^3\delta_x^2\delta_y^2\delta_z^2)]u^k \tag{6.6.11}$$

用 von Neumann 方法可得该式的增长因子为

$$G_{DR} = \frac{1+a_1a_2+a_1a_3+a_2a_3+a_1a_2a_3}{(1+a_1)(1+a_2)(1+a_3)} \tag{6.6.12}$$

其中

$$a_i = 4r\sin^2\frac{\sigma_i h}{2}, \quad i=1,2,3 \tag{6.6.13}$$

由于 $|G_{DR}| \leqslant 1$, 所以三维 DR 格式 (6.6.8)~(6.6.10) 无条件稳定. 可以证明, (6.6.11) 的局部截断误差的首项为

$$-\frac{1}{12}rh^4\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}+\frac{\partial^4 u}{\partial z^4}\right) - \frac{1}{2}r^2h^4\Delta^2 u \tag{6.6.14}$$

其中算子

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{6.6.15}$$

所以该格式的精度为 $O(\Delta t+h^2)$. (6.6.8)~(6.6.10) 式的中间变量的边界值计算公式为

$$\begin{aligned} u^{k+\frac{1}{3}} &= \psi^k + (1-r\delta_y^2)(1-r\delta_z^2)(\psi^{k+1}-\psi^k) \\ u^{k+\frac{2}{3}} &= \psi^k + (1-r\delta_z^2)(\psi^{k+1}-\psi^k) \end{aligned} \tag{6.6.16}$$

这比 $u^{k+\frac{1}{3}} = u^{k+\frac{2}{3}} = \psi^{k+1}$ 更合理.

Douglas 和 Brian(1961) 给出了一个精度更高的格式, 是 CN 格式基础上的修正, 为

$$\frac{u^{k+\frac{1}{3}}-u^k}{\Delta t} = \frac{1}{h^2}\left[\frac{1}{2}\delta_x^2(u^{k+\frac{1}{3}}+u^k)+\delta_y^2 u^k+\delta_z^2 u^k\right] \tag{6.6.17}$$

$$\frac{u^{k+\frac{2}{3}}-u^k}{\Delta t} = \frac{1}{h^2}\left[\frac{1}{2}\delta_x^2(u^{k+\frac{1}{3}}+u^k)+\frac{1}{2}\delta_y^2(u^{k+\frac{2}{3}}+u^k)+\delta_z^2 u^k\right] \tag{6.6.18}$$

$$\frac{u^{k+1}-u^k}{\Delta t} = \frac{1}{h^2}\left[\frac{1}{2}\delta_x^2(u^{k+\frac{1}{3}}+u^k)+\frac{1}{2}\delta_y^2(u^{k+\frac{2}{3}}+u^k)+\frac{1}{2}\delta_z^2(u^{k+1}+u^k)\right] \tag{6.6.19}$$

上面每个方程都对应一个三对角方程, 可分别解得 $u^{k+\frac{1}{3}}$, $u^{k+\frac{2}{3}}$ 和 u^{k+1}. 重新整理第一个方程, 前两个方程相减, 最后两个方程相加, 可得到下面DB **格式**

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)u^{k+\frac{1}{3}}=\left[1+\frac{r}{2}(\delta_x^2+2\delta_y^2+2\delta_z^2)\right]u^k \tag{6.6.20}$$

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u^{k+\frac{2}{3}}=-\frac{r}{2}\delta_y^2u^k+u^{k+\frac{1}{3}} \tag{6.6.21}$$

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u^{k+1}=-\frac{r}{2}\delta_z^2u^k+u^{k+\frac{2}{3}} \tag{6.6.22}$$

消去 $u^{k+\frac{1}{3}}$ 和 $u^{k+\frac{2}{3}}$ 后得到

$$\begin{aligned}&\left[\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)\left(1-\frac{r}{2}\delta_z^2\right)\right]u^{k+1}=\left[1+\frac{r}{2}(\delta_x^2+\delta_y^2+\delta_z^2)\right.\\&\left.+\frac{r^2}{4}(\delta_x^2\delta_y^2+\delta_x^2\delta_z^2+\delta_y^2\delta_z^2)-\frac{r^3}{8}\delta_x^2\delta_y^2\delta_z^2\right]u^k\end{aligned} \tag{6.6.23}$$

(6.6.23) 中的系数是 27 点算子, 可证明其局部截断误差的首项为

$$-\frac{1}{12}rh^4\left(\frac{\partial^4u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4u}{\partial y^4}+\frac{\partial^4u}{\partial z^4}\right) \tag{6.6.24}$$

所以 DB 格式是精度为 $O(\Delta t^2+h^2)$ 的格式, 增长因子为

$$G_{DB}=\frac{1-(a_1+a_2+a_3)+(a_1a_2+a_1a_3+a_2a_3)+a_1a_2a_3}{1+(a_1+a_2+a_3)+(a_1a_2+a_1a_3+a_2a_3)+a_1a_2a_3} \tag{6.6.25}$$

由于 $|G_{DB}|\leqslant 1$ 恒成立, 故 DB 格式是无条件稳定的. 由 (6.6.17) ~(6.6.19) 式可确定中间变量的边界值公式为

$$u^{k+\frac{1}{3}}=\psi^k+\left(1+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)\left(1-\frac{r}{2}\delta_z^2\right)(\psi^{k+1}-\psi^k) \tag{6.6.26}$$

$$u^{k+\frac{2}{3}}=\psi^k+(1-\frac{r}{2}\delta_z^2)(\psi^{k+1}-\psi^k) \tag{6.6.27}$$

注意 DB 格式在一维情形是 CN 格式, 在二维情形是 PR 格式, 另外, 在 (6.6.19) 式中若 $u^{k+\frac{1}{3}}$ 替换成 $u^{k+\frac{2}{3}}$, 则将失去无条件稳定性.

Fairweather 等 (1967) 曾提出一个截断误差阶为 $O(\Delta t^2+h^4)$ 的 ADI 格式, 是 MF 格式 (6.5.38)~(6.5.39) 的推广, 称为推广的 MF 格式 (EMF 格式), 其组合格式为

$$\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_z^2\right]u^{k+1} \tag{6.6.28}$$

$$=\left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]\left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]\left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_z^2\right]u^k \tag{6.6.29}$$

其增长因子为

$$G_{EMF}=\frac{\left[2\left(r+\frac{1}{6}\right)\sin^2\frac{\sigma_1h}{2}-1\right]\left[2\left(r+\frac{1}{6}\right)\sin^2\frac{\sigma_2h}{2}-1\right]\left[2\left(r+\frac{1}{6}\right)\sin^2\frac{\sigma_3h}{2}-1\right]}{\left[2\left(r-\frac{1}{6}\right)\sin^2\frac{\sigma_1h}{2}+1\right]\left[2\left(r-\frac{1}{6}\right)\sin^2\frac{\sigma_2h}{2}+1\right]\left[2\left(r-\frac{1}{6}\right)\sin^2\frac{\sigma_3h}{2}+1\right]} \tag{6.6.30}$$

上式对所有的 r 均有 $|G_{EMF}| \leqslant 1$, 因此是无条件稳定的, 可用分裂的方法来计算 (6.6.29) 式, 写成

$$\begin{aligned}
\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_z^2\right]u^{k+\frac{1}{3}} &= \left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_z^2\right]u^k \\
\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u^{k+\frac{2}{3}} &= \left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_y^2\right]u^{k+\frac{1}{3}} \\
\left[1-\frac{1}{2}\left(r-\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]u^{k+1} &= \left[1+\frac{1}{2}\left(r+\frac{1}{6}\right)\delta_x^2\right]u^{k+\frac{2}{3}}
\end{aligned} \tag{6.6.31}$$

格式 (6.6.31) 的中间变量的边界条件可取

$$\begin{cases}
u^{k+\frac{1}{3}} = \psi^{k+\frac{1}{3}} \\
u^{k+\frac{2}{3}} = \psi^{k+\frac{2}{3}}
\end{cases} \tag{6.6.32}$$

与二维一样, 可以导出若干三维 LOD 方法的计算公式, 将原三维抛物型方程 (6.6.1) 写成三个只包含一个空间维数的方程

$$\begin{cases}
\dfrac{1}{3}\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\
\dfrac{1}{3}\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} \\
\dfrac{1}{3}\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial z^2}
\end{cases} \tag{6.6.33}$$

若对 (6.6.33) 式中的空间二阶导数用二阶显式中心近似, 时间导数用显式向前近似, 则可得显式格式为

$$\begin{aligned}
u^{k+\frac{1}{3}} &= (1+r\delta_x^2)u^k \\
u^{k+\frac{2}{3}} &= (1+r\delta_y^2)u^{k+\frac{1}{3}} \\
u^{k+1} &= (1+r\delta_z^2)u^{k+\frac{2}{3}}
\end{aligned} \tag{6.6.34}$$

其中 $r = \dfrac{\Delta t}{3h^2}$. 消去 $u^{k+\frac{1}{3}}$ 和 $u^{k+\frac{2}{3}}$, 得

$$u^{k+1} = (1+r\delta_x^2)(1+r\delta_y^2)(1+r\delta_z^2)u^k \tag{6.6.35}$$

该格式展开后涉及 27 个结点, 精度为 $O(\Delta t + h^2)$, 稳定性条件为 $r \leqslant \frac{1}{2}$. 相应的中间变量的边界条件为

$$\begin{aligned}
u^{k+\frac{1}{3}} &= \psi^{k+\frac{1}{3}} \\
u^{k+\frac{2}{3}} &= \psi^{k+\frac{2}{3}}
\end{aligned} \tag{6.6.36}$$

易知, (6.6.33) 式的 CN 格式为

$$\begin{aligned}
\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)u^{k+\frac{1}{3}} &= \left(1+\frac{r}{2}\delta_x^2\right)u^k \\
\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u^{k+\frac{2}{3}} &= \left(1+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)u^{k+\frac{1}{3}} \\
\left(1-\frac{r}{2}\delta_z^2\right)u^{k+1} &= \left(1+\frac{r}{2}\delta_z^2\right)u^{k+\frac{2}{3}}
\end{aligned} \tag{6.6.37}$$

若算子互易, 则 (6.6.37) 式的合成格式为

$$\left(1-\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\left(1-\frac{r}{2}\delta_y^2\right)\left(1-\frac{r}{2}\delta_z^2\right)u^{k+1}=\left(1+\frac{r}{2}\delta_x^2\right)\left(1+\frac{r}{2}\delta_y^2\right)\left(1+\frac{r}{2}\delta_z^2\right)u^k \quad (6.6.38)$$

精度为 $O(\Delta t^2+h^2)$, 该格式无条件稳定.

若对 (6.6.33) 式中的二阶导数用隐式近似, 时间导数用向后隐式 (BI) 格式

$$\begin{aligned}&(1-r\delta_x^2)u^{k+\frac{1}{3}}=u^k\\&(1-r\delta_y^2)u^{k+\frac{2}{3}}=u^{k+\frac{1}{3}}\\&(1-r\delta_z^2)u^{k+1}=u^{k+\frac{2}{3}}\end{aligned} \quad (6.6.39)$$

若算子互易, 则可得格式 (6.6.39) 的组合形式为

$$(1-r\delta_x^2)(1-r\delta_y^2)(1-r\delta_z^2)u^{k+1}=u^k \quad (6.6.40)$$

精度为 $O(\Delta t+h^2)$ 阶, 增长因子为

$$G_{BI}=\frac{1}{(1+a_1)(1+a_2)(1+a_3)} \quad (6.6.41)$$

其中

$$a_i=4\sin^2\frac{\sigma_i h}{2},\quad i=1,2,3 \quad (6.6.42)$$

因此格式 (6.6.39) 无条件稳定.

§6.7 算子形式的热传导方程

考虑算子形式的热传导方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}+Au=f, & (x,t)\in\Omega\times[0,T]\\ u|_{t=0}=g, & x\in\Omega\end{cases} \quad (6.7.1)$$

其中 $A\geqslant 0$, u,f,g 均充分光滑.

§6.7.1 CN 格式

易知, 方程 (6.7.1) 的 CN 格式为

$$\frac{u^{k+1}-u^k}{\Delta t}+A^k\frac{u^{k+1}+u^k}{2}=f^k,\quad u^0=g \quad (6.7.2)$$

其中差分算子 A^k 表示 A 的差分近似, $A^k=A(t^{k+\frac{1}{2}})$. (6.7.2) 式是一个二阶精度格式. 设 $(A^j u,u)\geqslant 0$, 先讨论 $f=0$ 的情形, 这时 (6.7.2) 式可写成

$$u^{k+1}=\left(I+\frac{\Delta t}{2}A^k\right)^{-1}\left(I-\frac{\Delta t}{2}A^k\right)u^k \quad (6.7.3)$$

记算子

$$T^k = \left(I + \frac{\Delta t}{2} A^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A^k\right) \tag{6.7.4}$$

则由 Kellogg 引理 1.4.2 知

$$\|T^k\| \leqslant 1 \tag{6.7.5}$$

故

$$\|u^{k+1}\| \leqslant \|T^k\| \, \|u^k\| \leqslant \|u^k\| \leqslant \cdots \leqslant \|u^0\| = \|g\| \tag{6.7.6}$$

这说明格式 (6.7.2) 在 $f \neq 0$ 时稳定.

若 $f \neq 0$, 则 (6.7.2) 可写成

$$u^{k+1} = T^k u^k + \Delta t \left(I + \frac{\Delta t}{2} A^k\right)^{-1} f^k \tag{6.7.7}$$

由引理 1.4.1 知

$$\left\| \left(I + \frac{\Delta t}{2} A^j\right)^{-1} \right\| \leqslant 1 \tag{6.7.8}$$

故

$$\|u^{k+1}\| \leqslant \|u^k\| + \Delta t\|f^k\| \leqslant \|u^{k-1}\| + \Delta t\|f^{k-1}\| + \Delta t\|f^k\| \leqslant \cdots \leqslant \|g\| + \Delta t \sum_{k=0}^{K} \|f^k\| \tag{6.7.9}$$

记 $\|f\| = \max\limits_k \|f^k\|$, 并注意到 $k\Delta t \leqslant T$, 则得

$$\|u^{k+1}\| \leqslant \|g\| + k\Delta t\|f\| \leqslant \|g\| + T\|f\| \tag{6.7.10}$$

其中 T 为求解时间区间的上界, 即 $t \in [0, T]$, 上式给出了解的估计, 它表明格式 (6.7.2)~ (6.7.3) 关于初始条件及右端均稳定.

§6.7.2 CN 分裂格式及循环对称分裂格式

很多情况下算子 A 可分裂成更多个算子分量, 一般有

$$A = \sum_{i=1}^{m} A_i \tag{6.7.11}$$

其中 $A_i \geqslant 0, i = 1, 2, \cdots, m$. 记

先讨论 $f = 0$ 的情况. CN 分裂格式为

$$\frac{u^{k+\frac{i}{m}} - u^{k+\frac{i-1}{m}}}{\Delta t} + A_i^k \frac{u^{k+\frac{i}{m}} + u^{k+\frac{i-1}{m}}}{2} = 0, \quad u^0 = g, \quad i = 1, 2, \cdots, m, \ k = 0, 1, 2, \cdots \tag{6.7.12}$$

其中

$$A_i^k = A_i(t^{k+\frac{1}{2}}) \quad 或 \quad A_i^k = \frac{1}{2}[A_i(t^k) + A_i(t^{k+1})] \tag{6.7.13}$$

该格式由 m 个 CN 格式组成, 第 i 个格式在 $\left[k+\frac{i}{m}, k+\frac{i-1}{m}\right]$ 上计算. 为考虑格式的稳定性, 消去中间变量后写成显式形式

$$u^{k+1} = \prod_{i=m}^{1} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right) u^k \tag{6.7.14}$$

应用 Kellogg 引理 1.4.2 得

$$\|u^{k+1}\| \leqslant \|u^k\| \leqslant \cdots \|g\| \tag{6.7.15}$$

即格式 (6.7.12) 关于初始条件绝对稳定.

现考虑逼近阶, 设

$$\frac{\Delta t}{2}\|A_i^k\| < 1, \quad i = 1, 2, \cdots, m \tag{6.7.16}$$

则利用展开式

$$\left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} = I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k + \left(\frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^2 + \cdots \tag{6.7.17}$$

有

$$\left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right) = I - \Delta t A_i^k + \frac{\Delta t^2}{2}(A_i^k)^2 + O(\Delta t^3) \tag{6.7.18}$$

其中 $A^k = \sum_{i=1}^{m} A_i^k$, $(A^k)^2 = (\sum_{i=1}^{m} A_i^k)^2$. 若 $A_i^k (i = 1, 2, \cdots, m)$ 彼此均可交换, 则有

$$\prod_{i=m}^{1} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right) = I - \Delta t A^k + \frac{\Delta t^2}{2}(A^k)^2 + O(\Delta t^3) \tag{6.7.19}$$

将该式及 u^{k+1} 与 u^k 在 $t = t_{k+\frac{1}{2}}$ 处的 Taylor 展开式代人 (6.3.24) 式, 得

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^{k+\frac{1}{2}} + A^k u^{k+\frac{1}{2}} + O(\Delta t^2) = 0 \tag{6.7.20}$$

所以这时格式 (6.7.12) 为二阶逼近, 但当 A_i^k 不可交换时, 只为一阶近似.

可以构造**二阶循环对称分裂格式**$(k = 1, 3, 5)$

当 $t \in [t^{k-1}, t^k]$ 时

$$\frac{u^{k+\frac{i}{m}-1} - u^{k+\frac{i-1}{m}-1}}{\Delta t} + A_i^k \frac{u^{k+\frac{i}{m}-1} + u^{k+\frac{i-1}{m}-1}}{2} = 0, \quad u^0 = g \tag{6.7.21}$$

当 $t \in [t^k, t^{k+1}]$ 时

$$\frac{u^{k+1-\frac{i-1}{m}} - u^{k+1-\frac{i}{m}}}{\Delta t} + A_i^k \frac{u^{k+1-\frac{i-1}{m}} + u^{k+1-\frac{i}{m}}}{2} = 0, \quad i = m, m-1, \cdots, 1 \tag{6.7.22}$$

其中 $A_i^k = A_i(t^k)$. (6.7.21)~(6.7.21) 式可以化成

$$u^k = \prod_{i=m}^{1} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right) u^{k-1}, \quad u^0 = g \tag{6.7.23}$$

$$u^{k+1} = \prod_{i=1}^{m} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right) u^k \tag{6.7.24}$$

由上两式消去 u^k 得

$$u^{k+1} = \prod_{i=1}^{m} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right) \prod_{i=m}^{1} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right) u^{k-1} \tag{6.7.25}$$

利用 Kellogg 引理 1.4.2 知, 上式右端 u^{k-1} 前的算子范数不大于 1, 从而有

$$||u^{k+1}|| \leqslant ||u^{k-1}|| \leqslant ||u^{k-1}|| \leqslant \cdots ||g||$$

所以二循环对称分裂格式绝对稳定, 若 $\frac{\Delta t}{2}||A_i^k|| < 1 (i = 1, 2, \cdots, m)$, 则由 (6.7.25) 式有

$$\left[\prod_{i=m}^{1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)\right] u^{k+1}$$
$$= \left[\prod_{i=m}^{1} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)^{-1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k\right)\right] u^{k-1}$$

再进一步化解可得

$$(I + \Delta A^k) u^{k+1} = (I - \Delta A^k) u^{k-1}$$

也即

$$\frac{u^{k+1} - u^{k-1}}{2\Delta t} + A^k \frac{u^{k+1} + u^{k-1}}{2} = 0$$

所以二阶循环对称分裂格式等价于区间 $[t^{k-1}, t^{k+1}]$ 上的 CN 格式, 具有同阶 (二阶) 精度, 但 CN 格式不要求 $A_i^k (i = 1, \cdots, m)$ 可交换.

对 $f = 0$ 的情形, Дбяконов 提出了另一个不同的二阶循环分裂算法 $(k = 0, 1, 2, \cdots)$

当 $t \in [t^k, t^{k+\frac{1}{2}}]$ 时

$$\frac{u^{k+\frac{i}{2m}} - u^{k+\frac{i-1}{2m}}}{\Delta t/2} + A_i^k u^{k+\frac{i-1}{2m}} = 0, \quad u^0 = g, \quad i = 1, 2, \cdots, m-1 \tag{6.7.26}$$

当 $t \in [t^{k+\frac{1}{2}}, t^{k+1}]$ 时

$$\frac{u^{k+\frac{i}{2m}} - u^{k+\frac{i-1}{2m}}}{\Delta t/2} + A_{2m-i+1}^k u^{k+\frac{i}{2m}} = 0, \quad i = m+1, m+2, \cdots, 2m \tag{6.7.27}$$

其中 $A^k = A(t^{k+\frac{1}{2}})$. 该格式在 $t \in [t^k, t^{k+\frac{1}{2}}]$ 时间内为显式格式, 在 $t \in [t^{k+\frac{1}{2}}, t^{k+1}]$ 内为隐式. 实际上, 由 (6.7.26) 式消去中间变量得前半步的显格式

$$u^{k+\frac{1}{2}} = \prod_{i=m}^{1} (I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k) u^k, \quad u^0 = g \tag{6.7.28}$$

由 (6.7.27) 式消去中间变量得后半步的显格式

$$u^{k+1} = \prod_{i=1}^{m} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k \right)^{-1} u^{k+\frac{1}{2}}, \quad u^0 = g \tag{6.7.29}$$

故整个格式可写成

$$u^{k+1} = \prod_{i=1}^{m} \left(I + \frac{\Delta t}{2} A_i^k \right)^{-1} \prod_{i=m}^{1} \left(I - \frac{\Delta t}{2} A_i^k \right) u^k, \quad u^0 = g, \quad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{6.7.30}$$

类似地, 若 $\frac{\Delta t}{2} \|A_i^k\| < 1 (i = 1, 2, \cdots, m)$, 则格式 (6.7.26)~(6.7.27) 关于 t 是二阶精度, 若 $A_i^k (i = 1, 2, \cdots, m)$ 彼此可交换, 则绝对稳定.

当 $f \neq 0$ 时, 格式 (6.7.21)~(6.7.22) 变成 $(k = 1, 3, 5, \cdots)$

当 $t \in [t^{k-1}, t^k]$ 时

$$\frac{u^{k+\frac{i}{m}-1} - u^{k+\frac{i-1}{m}-1}}{\Delta t} + A_i^k \frac{u^{k+\frac{i}{m}-1} + u^{k+\frac{i-1}{m}-1}}{2} = 0, \quad \varphi^0 = g, \quad i = 1, 2, \cdots, m-1 \tag{6.7.31}$$

$$\frac{u^k - u^{k-\frac{1}{m}}}{\Delta t} + A_m^k \frac{u^k + u^{k-\frac{1}{m}}}{2} = f^k + \frac{\Delta}{2} A_m^k f^k \tag{6.7.32}$$

当 $t \in [t^k, t^{k+1}]$ 时

$$\frac{u^{k+\frac{1}{m}} - u^k}{\Delta t} + A_m^k \frac{u^{k+\frac{1}{m}} + u^k}{2} = f^k - \frac{\Delta}{2} A_m^k f^k \tag{6.7.33}$$

$$\frac{u^{k+1-\frac{i-1}{m}} - u^{k+1-\frac{i}{m}}}{\Delta t} + A_m^k \frac{u^{k+1-\frac{i-1}{m}} + u^{k+1-\frac{i}{m}}}{2} = 0, \quad i = m-1, \cdots, 1 \tag{6.7.34}$$

其中 $A_i^k = A_i(t^k)$, $f^k = f(t^k)$. (6.7.31)~(6.7.34) 式也即将 (6.7.21)~(6.7.22) 式中第一组格式中的最后一个及第二组格式中的第一个式子作了变换. 格式 (6.7.31)~(6.7.34) 具有二阶精度, 且绝对稳定, 可用下面的步骤来计算 $(k = 1, 3, 5, \cdots)$

1.

$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_i^k\right)u^{k+\frac{i}{m}-1}=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_i^k\right)u^{k+\frac{i-1}{m}-1},\quad u^0=g \tag{6.7.35}$$

2.

$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_m^k\right)u^k=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_m^k\right)u^{k-\frac{1}{m}}+\Delta t\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_i^k\right)f^k \tag{6.7.36}$$

3.

$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_m^k\right)u^{k+\frac{1}{m}}=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_m^k\right)(u^k+\Delta f^k) \tag{6.7.37}$$

4.

$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_m^k\right)u^{k+1-\frac{i-1}{m}}=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_i^k\right)u^{k+1-\frac{i}{m}},$$

$$i=m-1,m-2,\cdots,1 \tag{6.7.38}$$

特别地, 对 A 分裂成两个算子的特殊情况, 即 $A=A_1+A_2$, 二阶循环对称分裂格式为 $(k=1,3,5,\cdots)$

当 $t\in[t^{k-1},t^k]$ 时

$$\frac{u^{k-\frac{1}{2}}-u^{k-1}}{\Delta t}+A_1^k\frac{u^{k-\frac{1}{2}}+u^{k-1}}{2}=0,\quad u^0=g \tag{6.7.39}$$

$$\frac{u^k-u^{k-\frac{1}{2}}}{\Delta t}+A_2^k\frac{u^k+u^{k-\frac{1}{2}}}{2}=f^k+\frac{\Delta t}{2}A_2^kf^k \tag{6.7.40}$$

当 $t\in[t^k,t^{k+1}]$ 时

$$\frac{u^{k+\frac{1}{2}}-u^k}{\Delta t}+A_2^k\frac{u^{k+\frac{1}{2}}+u^k}{2}=f^k-\frac{\Delta t}{2}A_2^kf^k \tag{6.7.41}$$

$$\frac{u^{k+1}-u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t}+A_1^k\frac{u^{k+1}+u^{k+\frac{1}{2}}}{2}=0 \tag{6.7.42}$$

其中 $A_i^k=A_i(t^k)(i=1,2)$. 计算步骤如下:

1.

$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_1^k\right)u^{k-\frac{1}{2}}=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_1^k\right)u^{k-1},\quad u^0=g \tag{6.7.43}$$

2.

$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_2^k\right)u^k=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_2^k\right)u^{k-\frac{1}{2}}+\Delta t\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_2^k\right)f^k \tag{6.7.44}$$

3.

$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_2^k\right)u^{k+\frac{1}{2}}=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_2^k\right)(u^k+\Delta f^k) \tag{6.7.45}$$

4.
$$\left(I+\frac{\Delta t}{2}A_1^k\right)u^{k+1}=\left(I-\frac{\Delta t}{2}A_1^k\right)u^{k+\frac{1}{2}} \tag{6.7.46}$$

练 习

1. 证明近似方程 $\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+f$ 的 Hermite 差分格式

$$\left(1+\frac{1}{12}\delta_x^2\right)(u^{n+1}-u^n)=\frac{r}{2}\delta_x^2(u^{n+1}+u^n)+\frac{1}{2}\Delta t\left[f^{n+1}+\left(1+\frac{1}{6}\delta_x^2\right)f^n\right]$$

对固定的 $r=\frac{\Delta t}{h^2}$ 的截断误差阶为 $O(\Delta t^2)$.

2. 推导极坐标下混合问题

$$\begin{cases}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{r\partial r}(r\frac{\partial u}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2}+F(r,\theta,t), & 0\leqslant r\leqslant 1, 0\leqslant\theta<2\pi,\ t>0\\ u(1,\theta,t)=g(\theta,t), & 0\leqslant\theta<2\pi, t>0\\ u(r,\theta,0)=f(r,\theta), & 0\leqslant r\leqslant 1, 0\leqslant\theta<2\pi\end{cases}$$

的 CN 格式.

3. 证明三维 PR 格式

$$\begin{aligned}\left(1-\frac{r_x}{3}\delta_x^2\right)u_{j,k}^{n+\frac{1}{3}}&=\left(1+\frac{r_y}{3}\delta_y^2+\frac{r_z}{3}\delta_z^2\right)u_{j,k}^n\\ \left(1-\frac{r_y}{3}\delta_x^2\right)u_{j,k}^{n+\frac{2}{3}}&=\left(1+\frac{r_x}{3}\delta_x^2+\frac{r_z}{3}\delta_z^2\right)u_{j,k}^{n+\frac{1}{3}}\\ \left(1-\frac{r_z}{3}\delta_z^2\right)u_{j,k}^{n+1}&=\left(1+\frac{r_x}{3}\delta_x^2+\frac{r_y}{3}\delta_y^2\right)u_{j,k}^{n+\frac{2}{3}}\end{aligned}$$

是条件稳定的, 精度为 $O(\Delta t+\Delta x^2+\Delta y^2+\Delta z^2)$. 其中 $r_x=\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, $r_y=\frac{\Delta t}{\Delta y^2}$, $r_z=\frac{\Delta t}{\Delta z^2}$.

4. 对一维热传导初边值问题

$$\begin{cases}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & 0\leqslant x\leqslant 1\\ u(x,0)=\sin\pi x, & 0\leqslant x\leqslant 1\\ u(0,t)=u(1,t)=0, & t\geqslant 0\end{cases}$$

验证用分量变量法可得方程的解析解为 $u(x,t)=e^{-\pi t^2}\sin\pi x$. 取 $\Delta x=0.1$, $r=0.1$ 用显式格式数值求解, 检验数值解的精度.

5. 对均匀绝热杆中的温度变化问题

$$\begin{cases}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & 0\leqslant x\leqslant 1\\ u(x,0)=1, & 0\leqslant x\leqslant 1\\ u(0,t)=u(1,t), & t\geqslant 0\end{cases}$$

用分量变量法验证解析解为

$$u(x,t) = \frac{4}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)}e^{-(2n+1)^2\pi^2 t}\sin(2n+1)\pi x$$

并取 $\Delta x = 0.1$, $r = 0.1$, 分别用显式格式和隐式格式求解, 比较数值解的精度.

6. 试选择扩散方程差分格式

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\Delta t^2} = \frac{1}{h^2}[\theta\delta_x^2 u_j^{k+1} + (1-\theta)\delta_x^2 u_j^k]$$

中的 θ 使截断误差为 $O(\Delta t^2 + h^4)$.

7. 用有限体积法推导一维热传导方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的 CN 格式.

8. 构造二维扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

的 Du Fort-Frankel 格式, 并讨论其稳定性.

第七章　双曲型方程

双曲型偏微分方程可以用来模拟很多物理现象, 如波的传播, 弦的振动, 空气动力学流动. 本章讨论双曲型方程的差分方程. 我们先考虑线性对流或输运方程的差分格式, 然后讨论双曲型方程组和多维双曲型方程的差分格式.

§7.1 线性对流方程

考虑最简单的双曲型偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{7.1.1}$$

其中 $a \neq 0$ 为常数, 该方程有多种差分近似方法, 例如对 $\frac{\partial u}{\partial t}$ 和 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 都用中心差分, 或者对 $\frac{\partial u}{\partial t}$ 用向后差分, 而对 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 用中心差分, 等等, 可组合成多种差分格式.

§7.1.1 迎风格式

首先容易建立如下三种差分格式:

左偏心格式

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} + a\frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} = 0 \tag{7.1.2}$$

右偏心格式

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} + a\frac{u_{m+1}^n - u_m^n}{h} = 0 \tag{7.1.3}$$

中心差分格式

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} + a\frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} = 0 \tag{7.1.4}$$

前两个格式的截断误差阶为 $O(\Delta t+h)$, 第三个格式为 $O(\Delta t+h^2)$. 显然这三个格式和相应的微分方程相容, 也即当 $\Delta t,\ h\to 0$ 时, 差分方程 (7.1.2)~(7.1.4) 分别逼近微分方程 (7.1.1). 差分格式 (7.1.2)~(7.1.3) 通常称为**迎风格式**. 后面将看到, 迎风格式与特征线的走向有关.

下面用 von Neumann 稳定性方法分析迎风格式 (7.1.2)~(7.1.4) 的稳定性. 令 $u_m^n=v^ne^{i\sigma x}=v^ne^{i\sigma mh}$(其中 $\mathrm{i}=\sqrt{-1}$, σ 为实数), 分别代入 (7.1.2)~(7.1.4) 式中, 得到三种格式的增长因子分别为 $\left(r=\dfrac{\Delta t}{h}\right)$

左偏心格式

$$G_1(\Delta t,\sigma)=are^{-i\sigma h}+(1-ar) \tag{7.1.5}$$

右偏心格式

$$G_2(\Delta t,\sigma)=(1+ar)-are^{\mathrm{i}\sigma h} \tag{7.1.6}$$

中心差分格式

$$G_3(\Delta t,\sigma)=1-\mathrm{i}ar\sin\sigma h \tag{7.1.7}$$

对左偏心格式, 由 $|G_1(\Delta t,\sigma)|^2\leqslant 1$, 即要求 $ar(1-ar)\sin^2\frac{\sigma h}{2}\geqslant 0$ 得稳定性条件为 $a>0$, 且 $a\frac{\Delta t}{h}\leqslant 1$.

对右偏心格式, 由 $|G_2(\Delta t,\sigma)|^2\leqslant 1$, 即要求 $ar(1+ar)\sin^2\frac{\sigma h}{2}\leqslant 0$ 得稳定性条件为 $a<0$, 且 $|a|\frac{\Delta t}{h}\leqslant 1$.

对中心差分格式, $|G_3(\Delta t,\sigma)|^2=1+a^2r^2\sin^2\sigma h$, 不论对任何 r, 只要 $\sin^2\sigma h\neq 0$, 增长因子的绝对值恒大于 1, 格式不稳定, 因此中心差分格式是绝对不稳定的格式, 不能用于计算.

类似地, 还可以得到其他格式, 同上面的格式一起列于下表 7.1中, 这些差分格式的结点分布见图 7.1.

§7.1.2 Lax-Friedrichs 格式

Lax − Friedrichs 格式是

$$\frac{u_m^{n+1}-\frac{1}{2}(u_{m-1}^n+u_{m+1}^n)}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}=0 \tag{7.1.8}$$

也称 **Lax格式**. 实际上, 相当于将 $\frac{1}{2}(u_{m+1}^n+u_{m-1}^n)$ 代替中心差分格式 (7.1.4). 该格式的截断误差为

$$\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2u_m^n}{\partial t^2}-\frac{h^2}{2\Delta t}\frac{\partial^2u_m^n}{\partial^2x}+O(h^2+\frac{h^4}{\Delta t})=O(\Delta t+\frac{h^2}{\Delta t}+h^2) \tag{7.1.9}$$

所以与方程 (7.1.1) 条件相容. 在计算中, 通常 $\frac{h}{\Delta t}$ 取为常数, 所以 Lax-Friedrichs 格式的精度仍为 $O(\Delta t+h)$. 令 $u_m^n=v^ne^{i\sigma mh}$ 代入 (7.1.8), 可得增长因子为

$$G(\Delta t,\sigma)=\frac{1}{2}(e^{\mathrm{i}\sigma h}+e^{-\mathrm{i}\sigma h})-\frac{ar}{2}(e^{\mathrm{i}\sigma h}+e^{-\mathrm{i}\sigma h})=\cos\sigma h-\mathrm{i}ar\sin\sigma h \tag{7.1.10}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h}$, 从而有

$$|G(\Delta t,\sigma)|^2=\cos^2\sigma h+a^2r^2\sin^2\sigma h=1-(1-a^2r^2)\sin^2\sigma h \tag{7.1.11}$$

由 $|G|\leqslant 1$ 得稳定性条件 $|a|r\leqslant 1$.

表 7.1 双曲型方程 (7.1.1) 的常见差分格式

差分格式	稳定性条件	精度	显隐式	格式编号
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_m^n-u_{m-1}^n}{h}=0$	$a>0, ar\leqslant 1$	$O(\Delta t+h)$	显式	(a)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_m^n}{h}=0$	$a<0, \|a\|r\leqslant 1$	$O(\Delta t+h)$	显式	(b)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}=0$	不稳定	$O(\Delta t+h^2)$	显式	(c)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^{n-1}}{2\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}=0$	$\|a\|r<1$	$O(\Delta t^2+h^2)$	显式	(d)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^{n-1}}{2\Delta t}+a\frac{u_m^n-u_{m-1}^n}{h}=0$	不稳定	$O(\Delta t^2+h)$	显式	(e)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1}}{2h}=0$	稳定	$O(\Delta t+h^2)$	隐式	(f)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^{n-1}}{2\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1}}{2h}=0$	稳定	$O(\Delta t^2+h^2)$	隐式	(g)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_m^{n+1}-u_{m-1}^{n+1}}{h}=0$	稳定	$O(\Delta t+h)$	显隐式	(h)
$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^{n+1}-u_m^{n+1}}{h}=0$	稳定	$O(\Delta t+h)$	显隐式	(i)

例 1 分析表 7.1 中的**蛙跳格式**即

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^{n-1}}{2\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}=0 \tag{7.1.12}$$

的稳定性.

解 首先将 (7.1.12) 化成一个等价的二层差分格式. 令 $v_m^n=u_m^{n-1}$, 则 (7.1.12) 可化成

$$\begin{cases}u_m^{n+1}=v_m^n-ar(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)\\ v_m^{n+1}=u_m^n\end{cases} \tag{7.1.13}$$

令 $\boldsymbol{w}=[u\ v]^T$, 将 (7.1.13) 写成向量形式

$$\boldsymbol{w}_m^{n+1}=\begin{bmatrix}-ar & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{w}_{m+1}^n+\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{w}_m^n+\begin{bmatrix}ar & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{w}_{m-1}^n \tag{7.1.14}$$

令 $\boldsymbol{w}_m^n=\boldsymbol{g}^n e^{i\sigma mh}$, 代入上式得增长矩阵

$$G(\Delta t,\sigma)=\begin{bmatrix}-2ari\sin\sigma h & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{7.1.15}$$

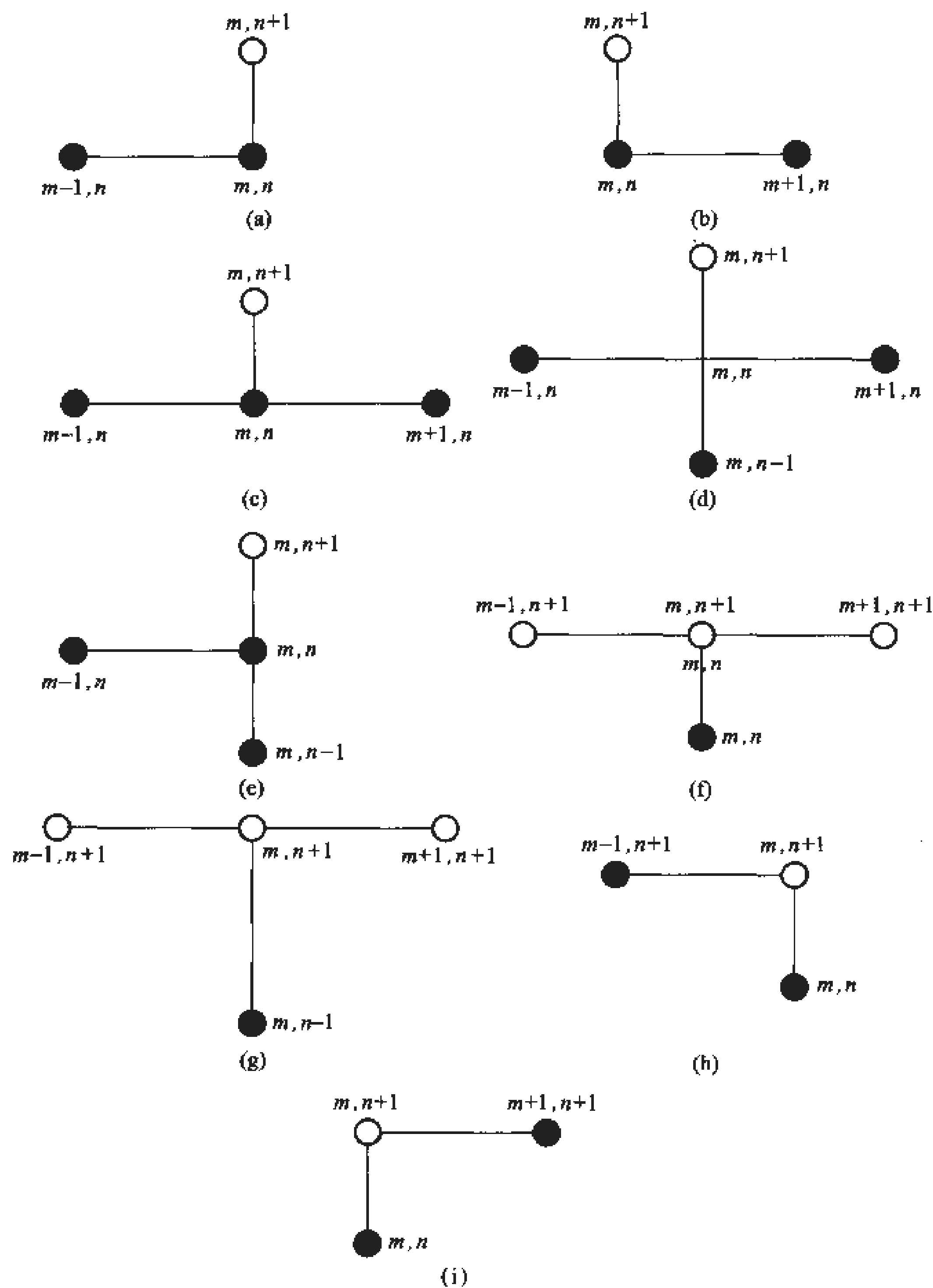


图 7.1　表 7.1 中各种差分格式的结点示意图

其特征值为

$$\lambda_{1,2} = -ari\sin\sigma h \pm \sqrt{1 - a^2r^2\sin^2\sigma h} \tag{7.1.16}$$

若 $|a|r \leqslant 1$, 则 $|\lambda_{1,2}| = 1$, 此时满足 von Neumann 条件. 若 $|a|r < 1$, 则 $G(\Delta t, \sigma)$ 有两个互不相同的特征值, 格式稳定. 当 $|a|r = 1$ 时, 取 $ar = 1, \sigma h = \frac{1}{2}$, 则

$$G = \begin{bmatrix} -2\mathrm{i} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad G^2 = \begin{bmatrix} -3 & -2\mathrm{i} \\ -2\mathrm{i} & 1 \end{bmatrix}, \quad G^4 = \begin{bmatrix} 5 & 4\mathrm{i} \\ 4\mathrm{i} & -3 \end{bmatrix} \tag{7.1.17}$$

$$[G(\Delta t, \sigma)]^{2^n} = \begin{bmatrix} 2^n + 1 & 2^n\mathrm{i} \\ 2^n\mathrm{i} & 1 - 2\mathrm{i} \end{bmatrix}, \quad n \geqslant 2 \tag{7.1.18}$$

所以 $\|G^{2^n}\|_\infty = 2^{n+1} + 1 > 1$, 因此当 $|a|r = 1$ 时不稳定. 故蛙跳格式的稳定性条件为 $|a|r < 1$.

§7.1.3 Lax-Wendroff 格式

考虑 u_m^{n+1} 的 Taylor 展开

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^n + \frac{\Delta t^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_m^n + O(\Delta t^3) \tag{7.1.19}$$

将

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a\frac{\partial u}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{7.1.20}$$

代入上式, 得到

$$u_m^{n+1} = u_m^n - a\Delta t\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n + \frac{a^2\Delta t^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n + O(\Delta t^3) \tag{7.1.21}$$

将上式中的空间导数采用中心差分, 得

$$u_m^{n+1} = u_m^n - a\Delta t\frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} + \frac{a^2\Delta t^2}{2}\frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + O(\Delta t^3) \tag{7.1.22}$$

从而得差分格式

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} + a\frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} - \frac{a^2\Delta t}{2}\frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} = 0 \tag{7.1.23}$$

或

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{ar}{2}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) + \frac{a^2r^2}{2}(u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n) \tag{7.1.24}$$

其中 $r = \frac{\Delta t}{h}$. 该格式称为 **Lax − Wendroff** 格式. 在 (m, n) 点处的截断误差为

$$\begin{aligned}
E_m^n &= \frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^n + \frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n - \frac{a^2\Delta t h^2}{24} + O(h^4 + \Delta t^3) \\
&= \frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^n + \frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n + O(\Delta t h^2 + \Delta t^3 + h^4) \\
&= \frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^n + \frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n + O(rh^3 + \Delta t^3 + h^4) \\
&= O(\Delta t^2 + h^2)
\end{aligned} \tag{7.1.25}$$

因此 Lax-Wendroff 格式是一个时间和空间二阶精度的格式. 当 $ar=1$ 时, 格式简化为 $u_m^{n+1}=u_{m-1}^n$, 得到精确解, 令 $u_m^n=v^n e^{i\sigma mh}$, 代入 (7.1.24) 得

$$G(\Delta t,\sigma)=1-\frac{ar}{2}(e^{i\sigma h}-e^{-i\sigma h})+\frac{a^2r^2}{2}(e^{i\sigma h}-2+e^{-i\sigma h})$$
$$=1-2a^2r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}-iar\sin\sigma h \tag{7.1.26}$$

$$|G(\Delta t,\sigma)|^2=1-4a^2r^2(1-a^2r^2)\sin^4\frac{\sigma h}{2} \tag{7.1.27}$$

由 $|G|^2\leqslant 1$ 得稳定性条件为 $|a|r\leqslant 1$.

§7.1.4 MacCormack 格式

1969 年 MacCommack 引进了一个新的两步预测—校正格式

$$\bar{u}_m^{n+1}=u_m^n-a\Delta t\frac{u_{m+1}^n-u_m^n}{h} \tag{7.1.28}$$

$$u_m^{n+1}=\frac{1}{2}\left(u_m^n+\bar{u}_m^{n+1}-a\Delta t\frac{\bar{u}_m^{n+1}-\bar{u}_{m-1}^{n+1}}{h}\right) \tag{7.1.29}$$

下面推导该格式. 由 Taylor 展开

$$u_m^{n+1}=u_m^n+\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^n\Delta t+\frac{1}{2}\Delta t^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_m^n+O(\Delta t^3) \tag{7.1.30}$$

并将 $\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^n=-a\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n$, $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_m^n=a^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n$ 代入上式, 得

$$u_m^{n+1}=u_m^n-a\Delta t\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n+\frac{1}{2}a^2\Delta t^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n+O(\Delta t^3) \tag{7.1.31}$$

再将中心差分格式

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n=\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}+O(h^2),\quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n=\frac{u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n}{h^2}+O(h^2) \tag{7.1.32}$$

代入 (7.1.31) 式得差分格式

$$u_m^{n+1}=u_m^n-\frac{a\Delta t}{2h}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)+\frac{a^2\Delta t^2}{2h^2}(u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m+1}^n)$$
$$=\frac{1}{2}u_m^n+\frac{1}{2}\left[u_m^n-\frac{a\Delta t}{h}(u_{m+1}^n-u_m^n)\right]$$
$$-\frac{a\Delta t}{2h}\left\{\left[u_m^n-\frac{a\Delta t}{h}(u_{m+1}^n-u_m^n)\right]\right.$$
$$\left.-\left[u_{m-1}^n-\frac{a\Delta t}{h}(u_m^n-u_{m-1}^n)\right]\right\} \tag{7.1.33}$$

令

$$\bar{u}_m^{n+1} = u_m^n - a\frac{\Delta t}{h}(u_{m+1}^n - u_m^n) \tag{7.1.34}$$

则 (7.1.33) 式可写成

$$\bar{u}_m^{n+1} = \frac{1}{2}[u_m^n + \bar{u}_m^{n+1} - a\frac{\Delta t}{h}(\bar{u}_m^{n+1} - \bar{u}_{m-1}^{n+1})] \tag{7.1.35}$$

由 (7.1.34) 和 (7.1.35) 式即构成**预测校正格式**(7.1.28) 和 (7.1.29). 该格式称为 MacCormack 格式, 是一个二阶精度格式, 稳定性条件为 $|a|r \leqslant 1$.

对线性方程, 如这里讨论的线性对流方程, MacCormack 格式等同于 Lax-Wendroff 格式. 实际上, 联立 (7.1.28) 和 (7.1.29) 式消去校正步 (7.1.29) 中的预测值, 即得到 (7.1.23) 式.

§7.1.4.1 Wendroff 隐式格式

如图 7.2(a), 在点 $P\left(m-\frac{1}{2}, n+\frac{1}{2}\right)$ 处建立差分格式, 对 $\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_P$ 与 $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_P$ 分别用 $\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_G + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_E\right]$ 与 $\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_H + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_F\right]$ 来近似, 即对方程 (7.1.1) 在 P 点的值

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}\right)_P = 0 \tag{7.1.36}$$

用

$$\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_G + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_E\right] + \frac{a}{2}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_H + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_F\right] = 0 \tag{7.1.37}$$

代替, 然后再对上式用中心差分格式近似

$$\frac{1}{2}\left(\frac{u_D - u_A}{\Delta t} + \frac{u_C - u_B}{\Delta t}\right) + \frac{a}{2}\left(\frac{u_B - u_A}{h} + \frac{u_C - u_D}{h}\right) = 0 \tag{7.1.38}$$

也即

$$\frac{1}{2}\left(\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} + \frac{u_{m-1}^{n+1} - u_{m-1}^n}{\Delta t}\right) + \frac{a}{2}\left(\frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} + \frac{u_m^{n+1} - u_{m-1}^{n+1}}{h}\right) = 0 \tag{7.1.39}$$

此即**Wendroff 格式**. 对初边值问题, 可将 (7.1.39) 式改写成显式形式

$$u_m^{n+1} = u_{m-1}^n + \frac{1-ar}{1+ar}(u_m^n - u_{m-1}^{n+1}) \tag{7.1.40}$$

其中 $r = \frac{\Delta t}{h}$. 易知截断误差阶为 $O(\Delta t^2 + h^2)$, 增长因子为

$$G(\Delta t, \sigma) = \frac{(1-ar)e^{i\sigma h} - (1+ar)}{(1+ar)e^{i\sigma h} + (1-ar)} \tag{7.1.41}$$

由于

$$|G|^2 = \frac{(1+a^2r^2) - (1-a^2r^2)\cos\sigma h}{(1+a^2r^2) + (1-a^2r^2)\cos\sigma h} \leqslant 1 \tag{7.1.42}$$

恒成立, 故 Wendroff 格式绝对稳定.

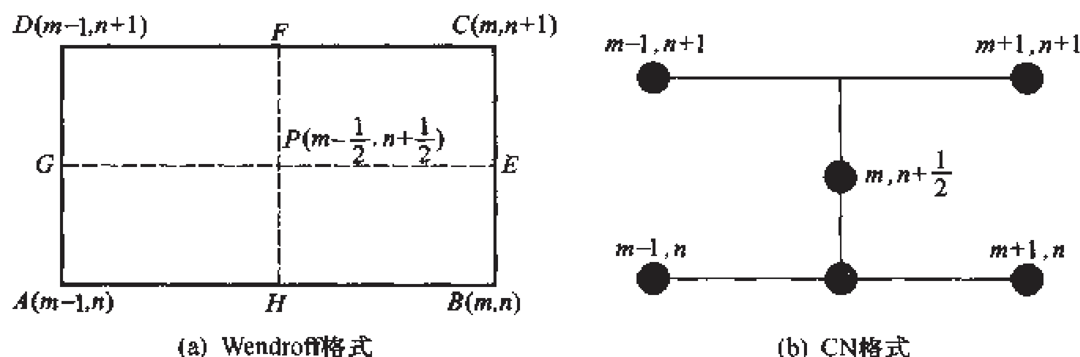


图 7.2 Wendroff 格式与 CN 格式结点示意图

§7.1.5 Crack-Nicolson 格式

如图 7.2(b), Crack-Nicolson 格 (CN 格式) 是在结点 $(m,n+1)$ 和 (m,n) 的连线中点 $(m,n+\frac{1}{2})$ 上建立的. $u(x,t)$ 关于时间 t 的一阶导数用中心差分逼近, 关于 x 的一阶导数用 $n+1$ 层和 n 层的二阶中心差分的平均来逼近

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+\frac{a}{4h}(u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1}+u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)=0 \tag{7.1.43}$$

CN 格式与 Wendroff 格式一样, 也是一个二阶精度的格式. 现进一步推广, 将差分格式建立在结点 $(m,n+1)$ 和 (m,n) 连线的任意点 $(m,n+0)$ 上, 其中 $0\leqslant\theta\leqslant 1$ 为参数. 可以得到

$$\frac{u_m^{n+1}}{\Delta t}+\frac{1}{2h}[\theta(u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1})+(1-\theta)(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)]=0$$

§7.2 特征线与差分格式

先讨论方程 (7.1.1) 的特征线. 在方程 (7.1.1) 中, u 包含两个方向的微商, 一个是 t 方向, 另一个是 x 方向. 现考虑 u 沿直线 $x-at=c$(c 为常数) 的方向导数

$$\frac{du}{dt}|_l=\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\frac{dx}{dt}=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x} \tag{7.2.1}$$

由方程 (7.1.1) 知 $\frac{du}{dt}|_l=0$, 即 u 沿直线 l 值保持不变, 这种直线是**特征线**. 图 7.3 是 $a>0$ 和 $a<0$ 时的特征线示意图.

假定边界条件是周期性的, 则可用分离变量法来求解方程 (7.1.1). 设

$$u(x,t)=u(mh,n\Delta t)=v(t)e^{\mathrm{i}\beta mh} \tag{7.2.2}$$

代人 (7.1.1) 式中, 得

$$\frac{dv}{dt}e^{\mathrm{i}\beta mh}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{7.2.3}$$

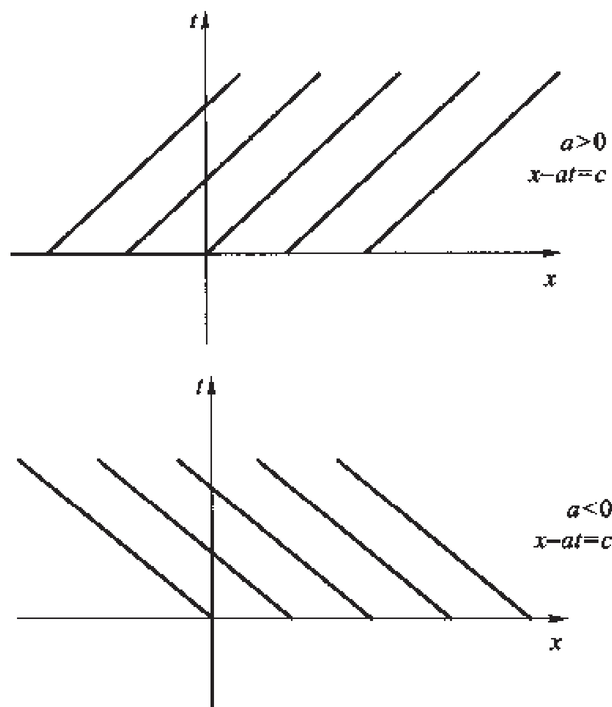


图 7.3 $a>0$ 和 $a<0$ 时的特征线, 特征线斜率为 $1/a$

令

$$\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{u_m^n-u_{m-1}^n}{h} \tag{7.2.4}$$

则

$$\frac{dv}{dt}e^{\mathrm{i}\beta mh}+\frac{a}{h}(ve^{\mathrm{i}\beta mh}-ve^{\mathrm{i}\beta(m-1)h})=0 \tag{7.2.5}$$

即

$$\frac{dv}{dt}=-\frac{a}{h}(1-e^{-\mathrm{i}\beta h})v\triangleq\alpha v \tag{7.2.6}$$

其中

$$\alpha=-\frac{a}{h}(1-e^{-\mathrm{i}\beta h}) \tag{7.2.7}$$

由此解得

$$v=Ce^{\alpha t} \tag{7.2.8}$$

其中 C 为某常数. 为保证当时间增加时, 解 $u(x,t)=v(t)e^{\mathrm{i}\beta mh}$ 有界, 必须要求 v 有界, 即 $\mathrm{Re}(\alpha)<0$, 故 $a>0$. 所以对方程 (7.1.1), 用空间向后差分近似 $\frac{\partial u}{\partial x}$, 为使计算稳定, 要求 $a>0$. 反之, 若 $a<0$, 则空间导数必须用向前差分, 否则不稳定. 由此可见迎风格式与特征线的走向有关. $\frac{\partial u}{\partial x}$ 前的系数 a 表示波运动的速度, $a>0$ 说明波沿正 x 方向运动. 此时用向后差分格式近似空间一阶导数可保证差分格式条件稳定, 由于差分的指向与波前进的方向相反, 故称**迎风或逆风**. 如图 7.4 所示.

下面通过特征线分析迎风格式的稳定性. 前面已指出, 当 $a>0$ 时, 稳定性条件是 $ar\leqslant 1$, 其中 $r=\frac{\Delta t}{h}$, 也即 $\frac{\Delta t}{h}\leqslant\frac{1}{a}$, 而 $\frac{1}{a}$ 正是微分方程 (7.1.1) 所对应特征线的

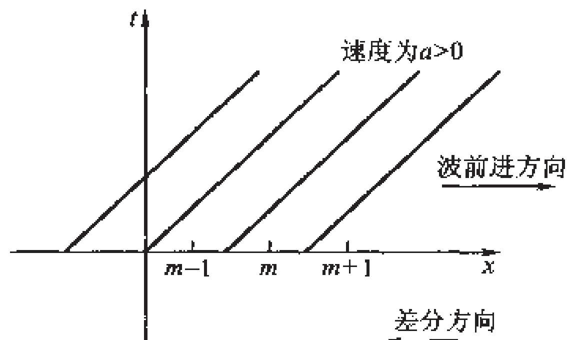


图 7.4 差分方向与波前进方向相反, 其中 $a>0$

斜率, 因此稳定性条件 $\frac{\Delta t}{h} \leqslant \frac{1}{a}$ 表明, 差分方程的依赖区域 ΔABC 必须包含微分方程的依赖区域 ΔABD(依赖区域的概念见 §7.10.1). 如图 7.5 所示.

差分格式的依赖区域包含微分方程的依赖区域. 这个条件称为 **Courant-Friedrichs-Lewy 条件**, 简称**CFL 条件**. 要注意 CFL 条件是格式稳定 (对线性偏微分方程初值边值问题的相容差分格式, 稳定性条件与收敛性等价) 的必要条件, 不是充分条件, 如对中心差分格式 (7.1.4), CFL 条件也是 $|a|r \leqslant 1$, 但我们已经知道, 在此条件下, 格式 (7.1.4) 既不稳定也不收敛, 中心差分格式 (7.1.4) 是一个不稳定的格式.

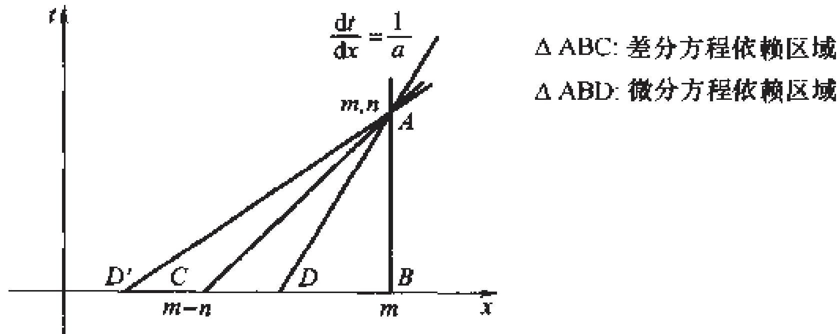


图 7.5 差分方程与微分方程的依赖区域

§7.2.1 用特征线方法构造差分格式

下面用特征线方法来构造差分格式. 设 $a>0$, 如下图 7.6 所示. 假定第 n 时间层的 u_m^n 值已知, 现求 P 点 $(m,n+1)$ 的值 u_m^{n+1}. 过 P 作特征线与 n 时间层相交于 Q 点, 假定 CFL 条件成立, 即 Q 在线段 BC 上. 由特征线的性质知, $u(P)=u(Q)$, 由于 $u(A), u(B), u(C), U(D)$ 均已知, 所以可以用下面几种方式来求出 $u(Q)$ 的值, 从而得到 $u(P)$ 的值.

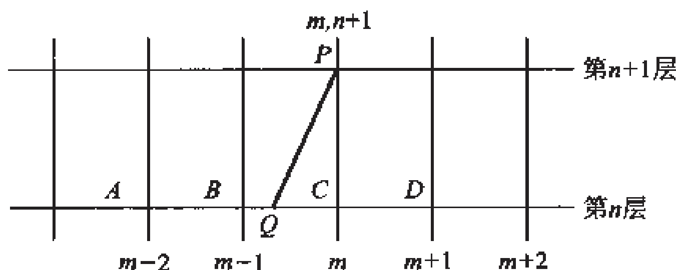


图 7.6 用特征线方法来构造差分格式

1. $u(B)$ 和 $u(C)$ 两点线性插值, 即

$$u(P)=u(Q)\approx u(B)\frac{\overline{CQ}}{h}+u(C)\frac{h-\overline{CQ}}{h}=u_{m-1}^{n}\frac{a\Delta t}{h}+u_{m}^{n}\frac{h-a\Delta t}{h} \tag{7.2.9}$$

即

$$u_m^{n+1}=(1-ar)u_m^n+aru_{m-1}^n \tag{7.2.10}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h}$. 此即迎风格式 (7.1.2).

2. $u(B)$ 和 $u(D)$ 两点线性插值, 即

$$\begin{aligned}u(P)=u(Q)&\approx\frac{1}{2}(1-ar)u(D)+\frac{1}{2}(1+ar)u(B)\\&=\frac{1}{2}(1-ar)u_{m+1}^n+\frac{1}{2}(1+ar)u_{m-1}^n\end{aligned} \tag{7.2.11}$$

即

$$\begin{aligned}u_m^{n+1}&=\frac{1}{2}(1-ar)u_{m+1}^n+\frac{1}{2}(1+ar)u_{m-1}^n\\&=\frac{1}{2}(u_{m-1}^n+u_{m+1}^n)-\frac{ar}{2}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)\end{aligned} \tag{7.2.12}$$

此即 Lax-Friedrichs 格式 (7.1.8).

3. $u(B)$, $u(C)$ 和 $u(D)$ 三点抛物型插值, 即

$$\begin{aligned}u(P)=u(Q)&\approx u(C)-ar[u(C)-u(B)]-\frac{ar(1-ar)}{2}[u(B)-2u(C)+u(D)]\\&=u(C)-\frac{ar}{2}(u(B)-u(D))+\frac{a^2r^2}{2}[u(B)-2u(C)+u(D)]\\&=u_m^n-\frac{ar}{2}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)+\frac{a^2r^2}{2}(u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n)\end{aligned} \tag{7.2.13}$$

即

$$u_m^{n+1}=u_m^n-\frac{ar}{2}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)+\frac{a^2r^2}{2}(u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n) \tag{7.2.14}$$

此即 Lax-Wendroff 格式 (7.1.24).

4. $u(A), u(B)$和$u(C)$ 三点抛物型插值, 即

$$u(P) = u(Q) \approx u(C) - ar(u(C) - u(B)) - \frac{ar(1-ar)}{2}(u(B) - 2u(C) + u(A))$$
$$= u_m^n - ar(u_m^n - u_{m-1}^n) - \frac{ar(1-ar)}{2}(u_m^n - 2u_{m-1}^n + u_{m-2}^n) \quad (7.2.15)$$

此即二阶迎风格式, 由 Beam 和 Warming(1976) 提出, 称为**Beam-Warming 格式**, 其增长因子为

$$G(\Delta t, \sigma) = 1 - 2ar\sin^2\frac{\sigma h}{2} - ar(1-ar)\left(4\sin^4\frac{\sigma h}{2} - \sin^2\sigma h\right)$$
$$-\mathrm{i}ar\sin\sigma h\left[1 + (1-ar)\sin^2\frac{\sigma h}{2}\right] \quad (7.2.16)$$

所以

$$|G|^2 = 1 - 4ar(1-ar)^2(2-ar)\left(\sin^4\frac{\sigma h}{2}\right) \quad (7.2.17)$$

由 $|G|^2 \leqslant 1$ 得稳定性条件 $ar \leqslant 2$. 类似地, 若 $a < 0$ 时, 则 Beam-Warming 格式 (7.2.15) 成为

$$u_m^{n+1} = u_m^n + ar(u_{m+1}^n - u_m^n) - \frac{ar}{2}(1-ar)(u_{m+2}^n - 2u_{m+1}^n + u_m^n) \quad (7.2.18)$$

稳定性条件为 $|a|r \leqslant 2$.

§7.3 数值耗散和数值频散

§7.3.1 偏微分方程的频散和耗散

当我们解析求解一个偏微分方程如 (7.1.1) 时, 经常利用分离变量方法, 即设解为

$$u(x,t) = \hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega t + k_x x)} = \hat{u}e^{\mathrm{i}\omega t}e^{ik_x x} \quad (7.3.1)$$

该式描述了空间和时间中的一个波, 其中 ω 是波的频率, k_x 是空间波数, 是 λ 波长为 $\lambda = \frac{2\pi}{k_x}$. 将 (7.3.1) 式代入 (7.1.1) 式, 可知只有当 $\omega = -ak_x$, 所设的解 u 才是方程 (7.1.1) 的解, 解为

$$u(x,t) = \hat{u}e^{\mathrm{i}\omega t}e^{ik_x x} = \hat{u}e^{ik_x(x-at)} \quad (7.3.2)$$

我们称 ω 与 k_x 之间的关系 $\omega = \omega(k_x)$ 称为**频散关系** . 通常我们看到, 当 ω 是实数时, 波传播的速度是 $-\frac{\omega}{k_x}$, 振幅没有衰减. 当 $\omega(k_x)$ 是线性关系时, 传播速度与频率无关. 假如各种频率成分不随时间增长或至少是衰减的, 则称偏微分方程的解是**耗散的** (dissipative). 假如各种频率成分不增长也不衰减, 则称偏微分方程的解是**非耗**

散的 (nondissipative); 假如不同波长的频率成分以不同速度传播, 则称偏微分方程的解是**频散的**(dispersion).

例 1 考虑下面两个偏微分方程的频散和耗散关系

$$(1)\frac{\partial u}{\partial t} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad (2)\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

解 (1) 将形式解 $u(x,t) = \hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega t + k_x x)}$ 代入原方程中, 得频散关系 $\omega = \mathrm{i}\nu k_x^2$, 其解为 $u(x,t) = \hat{u}e^{-\nu k_x^2 t}e^{\mathrm{i}k_x x}$. 可以看到, 波不随时间移动但随时间衰减. 当 ω 是纯虚数时, 波的振幅或者增长或者衰减, 这是抛物型方程的特征.

(2) 同样将形式解 $u(x,t) = \hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega t + k_x x)}$ 代入, 得频散关系为 $\omega = k_x^3 c$, 解为

$$u(x,t) = \hat{u}e^{\mathrm{i}(k^3 ct + k_x x)} = \hat{u}e^{\mathrm{i}k_x(x + k_x^2 ct)}$$

可以看到, 波传播的速度为 $k_x^2 c$. 显然, 不同的波数以不同的速度 $(-k_x^2 c)$ 传播, 因此, 方程的解有频散, 但没有耗散.

□

§7.3.2 差分格式的频散与耗散

下面分析与微分方程相容的差分格式的频散与耗散关系. 我们希望差分格式有与相应的微分方程相同的频散和耗散关系, 但通常不是这样. 类似地, 考虑解的离散 Fourier 形式

$$u_m^n = \hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t + k_x mh)} \tag{7.3.3}$$

取 $\omega = \omega(k_x)$ 以使该解满足差分方程. 函数 $\omega(k_x)$ 称为**离散频散关系**. 差分方程的频散关系 $\omega = \omega(k_x)$ 一般是复数, 因此, 我们令 $\omega = \alpha + \mathrm{i}\beta$, 其中 $\alpha = \alpha(k_x)$ 和 $\beta = \beta(k_x)$ 是实数. α 和 β 分别称为**实离散频散关系**和**虚离散频散关系**, 将 $\omega = \alpha + \mathrm{i}\beta$ 代入 (7.3.3) 式, 得

$$u_m^n = \hat{u}e^{\mathrm{i}(\alpha n\Delta t + \mathrm{i}\beta n\Delta t + k_x mh)} = \hat{u}e^{-\beta\Delta tn}e^{\mathrm{i}k_x(mh - (-\frac{\alpha}{k_x})n\Delta t)} \tag{7.3.4}$$

因此, 有

(1) 若对某 k_x, $\beta > 0$, 则格式是耗散的.

(2) 若对某 k_x, $\beta < 0$, 则差分方程的解无界, 格式不稳定.

(3) 若对所有 k_x, $\beta = 0$, 则格式是非耗散的.

同样

(1) 若 $\alpha = 0$, 则没有波的传播.

(2) 若 $\alpha \neq 0$, 则波以 $-\frac{\alpha}{k_x}$ 的速度传播.

(3) 若 $-\frac{\alpha}{k_x}$ 是 k_x 的非平凡 (nontrivial) 函数, 则格式有频散.

例 2 分析差分格式

$$u_m^{n+1} = u_m^n + r(u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n) \tag{7.3.5}$$

的频散和耗散关系, 其中 $r = \nu\frac{\Delta t}{h^2}$.

解 由前面的分析可知, 差分格式 (7.3.5) 当且仅当 $r \leqslant \frac{1}{2}$ 时稳定, 将 (7.3.3) 代人 (7.3.5) 中, 得

$$\begin{aligned}\hat{u}e^{\mathrm{i}[\omega(n+1)\Delta t+k_x mh]} = \hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t+k_x mh)} + r(\hat{u}e^{\mathrm{i}[\omega n\Delta t+k_x(m+1)h]} \\ -2\hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t+k_x mh)} + \hat{u}e^{\mathrm{i}[\omega n\Delta t+k_x(m-1)h]})\end{aligned} \tag{7.3.6}$$

化简得

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t} = 1 + r(e^{\mathrm{i}k_x h} - 2 + e^{-\mathrm{i}k_x h}) = 1 - 4r\sin^2\frac{k_x h}{2} \tag{7.3.7}$$

因为最后一项是实数, 假如令 $\omega = \alpha + \mathrm{i}\beta$, 则可写成

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t} = e^{-\beta\Delta t}e^{\mathrm{i}\alpha\Delta t} = 1 - 4\sin^2\frac{k_x h}{2} \tag{7.3.8}$$

于是 $\alpha = 0$, 因此没有耗散. 而 $\omega = \mathrm{i}\beta$, 其中

$$\beta = -\frac{1}{\Delta t}\ln\left|1 - 4r\sin^2\frac{k_x h}{2}\right| \tag{7.3.9}$$

因此, 离散频散关系为

$$\omega(k_x) = -\frac{\mathrm{i}}{\Delta t}\ln\left|1 - 4r\sin^2\frac{k_x h}{2}\right| \tag{7.3.10}$$

□

例 3 分析格式

$$u_m^{n+1} = u_m^n - r(u_{m+1}^n - u_m^n) \tag{7.3.11}$$

的耗散和频散关系, 其中 $r = \frac{a\Delta t}{h}$.

解 格式的稳定性条件是 $a < 0$, $|r| \leqslant 1$. 先考虑耗散关系. 将解的离散 Fourier 形式 (7.3.3) 代人差分格式 (7.3.11) 中, 两端再除以 $\hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t+k_x mh)}$, 得离散频散关系

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t} = e^{\mathrm{i}\alpha\Delta t}e^{-\mathrm{i}\beta\Delta t} = 1 + r - r\cos k_x h - \mathrm{i}r\sin k_x h \tag{7.3.12}$$

因此

$$e^{-\beta\Delta t} = |1 + r - r\cos k_x h - \mathrm{i}r\sin k_x h| = \sqrt{(1+r)^2 - 2r(1+r)\cos k_x h + r^2} \tag{7.3.13}$$

从而所有 $k_x \neq 0$ 的分量均衰减,$k_x = 0$ 的分量既不增长也不衰减, 因此, 格式是耗散的. 注意当 $r = -1$, $\beta = 0$ 时, 对所有的 k_x, 格式是非耗散的 (当取 $r = -1$ 时, 可以得到偏微分方程的精确解).

下面考虑频散关系, 若在式 (7.3.12) 两边除以其右端的振幅, 得

$$e^{\mathrm{i}\alpha\Delta t}=\cos\alpha\Delta t+\mathrm{i}\sin\alpha\Delta t=\frac{1+r-r\cos k_xh-\mathrm{i}r\sin k_xh}{|1+r-r\cos k_xh-\mathrm{i}r\sin k_xh|} \tag{7.3.14}$$

或

$$\tan\alpha\Delta t=\frac{-r\sin k_xh}{1+r-r\cos k_xh} \tag{7.3.15}$$

因此实离散频散关系可以写成

$$\alpha(k_x)=-\frac{1}{\Delta t}\arctan\frac{r\sin k_xh}{1+2r\sin^2\frac{k_xh}{2}} \tag{7.3.16}$$

因为 $\alpha(k_x)$ 不是 k_x 的线性函数 $\left(\frac{d^2\alpha}{dk_x^2}\neq 0\right)$, 因此差分格式是频散的.

下面由实离散频散关系 (7.3.16) 来分析波传播的速度. 采用渐近方法来分析. 当 k_xh 接近 π 时 (高频波 k_x 大, 波长 λ 小), 有

$$\alpha\approx-\frac{1}{\Delta t}\arctan(0) \tag{7.3.17}$$

为确定 arctan(0) 之值, 考虑方程 (7.3.14). 当 k_xh 接近 π 时, $\sin\alpha\Delta t$ 接近 0(符号由 $-r\sin k_xh$ 确定), $\cos\alpha\Delta t$ 接近

$$\frac{1+2r}{|1+2r|} \tag{7.3.18}$$

当 $r<-\frac{1}{2}$ 时, 正弦为正, 余弦为负, 在第二象限中, 从而取 $\alpha\approx\arctan(0)=\pi$; 当 $-\frac{1}{2}<r<0$ 时, 正弦为正, 余弦为正, 在第一象限中, 取 $\alpha\approx\arctan(0)=0$. 因此当 k_xh 接近 π 时, 高频波的传播速度为

$$-\frac{\alpha}{k_x}=\begin{cases}0 & r>-\frac{1}{2}\\ \frac{\alpha}{r} & r<-\frac{1}{2}\end{cases} \tag{7.3.19}$$

对低频波 (k_x 小, 波长 λ 大), 利用 $\sin z$, $\sin^2\frac{z}{2}$, $\frac{1}{1+z}$ 和 $\arctan z$ 的 Taylor 展开式, 即

$$\frac{1}{1+z}=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^nz^n=1-z+z^2+O(z^3),\quad (|z|<1) \tag{7.3.20}$$

$$\sin z=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}z^{2n+1}=z-\frac{z^3}{6}+O(z^5),\quad (z\in\mathbf{C}) \tag{7.3.21}$$

$$\sin^2 z=\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}z^{2n+1}\right]^2=z^2+O(z^4),\quad (z\in\mathbf{C}) \tag{7.3.22}$$

$$\arctan z=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{z}{2n+1}=z-\frac{z^3}{3}+O(z^5),\quad (|z|<1) \tag{7.3.23}$$

来化简 α(注意 k_xh 较小)

$$\begin{aligned}
\alpha &= -\frac{1}{\Delta t}\arctan\left[r\sin(k_xh)(1-2r\sin^2\frac{k_xh}{2}+4r^2\sin^4\frac{k_xh}{2})+O((k_xh)^6)\right]\\
&= -\frac{1}{\Delta t}\arctan\left\{r\left[(k_xh)-\frac{(k_xh)^3}{6}+O((k_xh)^5)\right]\left[1-2r\frac{(k_xh)^2}{4}+O((k_xh)^4)\right]\right\}\\
&= -\frac{1}{\Delta t}\arctan\left\{r\left[(k_xh)-r\frac{(k_xh)^3}{2}-\frac{(k_xh)^3}{6}+O((k_xh)^5)\right]\right\}\\
&= r\left[(kx_h)-\frac{r(k_xh)^3}{2}-\frac{(k_xh)^3}{6}\right]-\frac{r^3}{3}\left[(kx_h)-\frac{r(k_xh)^3}{2}-\frac{(k_xh)^3}{6}\right]^3+O((k_xh)^5)\\
&= r\left[(kx_h)-\frac{r(k_xh)^3}{2}-\frac{r^3(k_xh)^3}{6}\right]+O((k_xh)^4)\\
&= -\frac{1}{\Delta t}\left[rk_xh-\frac{r}{6}(1+3r+2r^2)(k_xh)^3+O(k_xh)^4\right]
\end{aligned}\tag{7.3.24}$$

也即

$$\alpha = -\frac{1}{\Delta t}\left[rk_xh-\frac{r}{6}(1+3r+2r^2)(k_xh)^3+O(k_xh)^4\right]\tag{7.3.25}$$

或

$$\alpha \approx -ak_x\left[1-\frac{1}{6}(1+2r)(1+r)(k_xh)^2\right]\tag{7.3.26}$$

因此波的形式解可以近似写成

$$\begin{aligned}
u_m^n &= \hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t+k_xmh)}\hat{u}e^{\mathrm{i}((\alpha+\mathrm{i}\beta)n\Delta t+k_xmh)}\\
&= \hat{u}e^{-\beta n\Delta t}e^{\mathrm{i}(\alpha n\Delta t+k_xmh)}\\
&\approx \hat{u}e^{-\beta n\Delta t}e^{\mathrm{i}[-akn\Delta t(1-\frac{1}{6})(1+2r)(1+r)(k_xh^2)+k_xmh]}\\
&= \hat{u}e^{-\beta n\Delta t}e^{\mathrm{i}k_x[mh-(a-\frac{a}{6}(1+2r)(1+r)(k_xh^2))n\Delta t}
\end{aligned}\tag{7.3.27}$$

所以当 $r=-\frac{1}{2}$ 或 $r=-1$ 时, 由上式知波的速度是 a, 这与解析解中的情况一样. 当 $-\frac{1}{2}<r\leqslant 0$ 时, 波度为

$$a-\frac{a}{6}(1+2r)(1+r)(k_xh^2)>a\tag{7.3.28}$$

当 $-1\leqslant r<-\frac{1}{2}$ 时, 波速为

$$a-\frac{a}{6}(1+2r)(1+r)(k_xh^2)<a\tag{7.3.29}$$

因此, 当 $|r|<\frac{1}{2}$ 时, 由差分格式计算出的低频分量波比解析确定的高频分量波慢 ($a<0$); 当 $\frac{1}{2}<|r|\leqslant 1$ 时, 由差分格式算出的低频分量波比解析确定的高频分量波快.

为了得到相位误差需求解

$$\tan\alpha\Delta t=\frac{-r\sin k_xh}{1+2r\sin^2\frac{k_xh}{2}} \tag{7.3.30}$$

由 (7.3.14) 式知

$$\sin\alpha\Delta t=\frac{-r\sin k_xh}{e^{-\beta\Delta t}} \tag{7.3.31}$$

$$\cos\alpha\Delta t=\frac{1+r-r\cos k_xh}{e^{-\beta\Delta t}}=\frac{1+2r\sin^2\frac{k_xh}{2}}{e^{-\beta\Delta t}} \tag{7.3.32}$$

对任意 $r<0$, $-r\sin k_xh\geqslant 0$, $\alpha\Delta t$ 必须在第一和第二象限. 因为 $1+2r\sin^2\frac{k_xh}{2}$ 的符号由正变到负, 所以

$$\arctan\frac{-r\sin k_xh}{1+2r\sin^2\frac{k_xh}{2}} \tag{7.3.33}$$

将通过 $\frac{\pi}{2}$. 对这里的例子, 取值在 $[0,\pi]$ 中. 微分方程 (7.3.1) 的相速度为 a, 而差分格式的相速度为 (7.3.33), 因而相位误差为

$$a-\arctan\frac{-r\sin k_xh}{1+2r\sin^2\frac{k_xh}{2}} \tag{7.3.34}$$

其中 $0\leqslant k_xh\leqslant\pi$.

□

例 3 分析 CN 格式

$$u_m^n+\frac{r}{4}(u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1})=u_m^n-\frac{r}{4}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n) \tag{7.3.35}$$

的耗散和频散关系, 其中 $r=a\frac{\Delta t}{h}$.

解 由上面求离散频散关系的方法可知, CN 格式的离散频散关系由下式给出

$$e^{\mathrm{i}\omega t}=G(\Delta t,k_xh) \tag{7.3.36}$$

其中 G 就是差分格式的增长因子, 上式表示 G 完全确定了格式的耗散和频散性质. 考虑耗散, 计算

$$e^{-\beta\Delta t}=|G(\Delta t,k_xh)| \tag{7.3.37}$$

或

$$\beta(k_x)=-\frac{1}{\Delta t}\ln|G(\Delta t,k_xh)| \tag{7.3.38}$$

即可. 考虑频散, 计算

$$\tan\alpha\Delta t=\frac{\mathrm{Im}G(\Delta t,k_xh)}{\mathrm{Re}G(\Delta t,k_x)} \tag{7.3.39}$$

即可, 其中 $\mathrm{Im}(z)$ 和 $\mathrm{Re}(z)$ 表示对复数 z 取虚部和实部. 因 CN 格式的增长因子为

$$G(\Delta t, k_x h) = \frac{1 - \frac{\mathrm{i}r}{2}\sin k_x h}{1 + \frac{\mathrm{i}r}{2}\sin k_x h} \tag{7.3.40}$$

所以

$$e^{-\beta\Delta t} = |G(\Delta t, k_x h)| = 1 \tag{7.3.41}$$

因此 CN 格式 (7.3.35) 无耗散.

再由 (7.3.39) 式和 (7.3.40) 式知, 有

$$\tan\alpha\Delta t = \frac{-r\sin k_x h}{1 - \frac{r^2}{4}\sin^2 k_x h} \tag{7.3.42}$$

因此Fourier分量为 $k_x h$ 的波的相位传播速度误差为

$$a - \left(-\frac{\alpha}{k_x}\right) = a - \frac{-a}{rk_x h}\arctan\frac{-r\sin k_x h}{1 - \frac{r^2}{4}\sin^2 k_x h} \tag{7.3.43}$$

对 $0 \leqslant k_x h \leqslant \pi$.

□

例 4 考虑 (7.1.1) 的中心差分格式

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{ar}{2}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) \tag{7.3.44}$$

的频散与耗散关系, 其中 $r = \frac{\Delta t}{h}$.

解 将 $u_m^n = \hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t + k_x mh)}$ 代入上式得

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t} = 1 - \mathrm{i}ar\sin k_x h \tag{7.3.45}$$

令 $\omega = \alpha + \mathrm{i}\beta$, 代入上式得

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t} = e^{\mathrm{i}\alpha\Delta t}e^{-\beta\Delta t} = 1 - \mathrm{i}ar\sin k_x h \tag{7.3.46}$$

因此耗散和频散关系分别为

$$\beta(k_x) = -\frac{1}{\Delta t}\ln\sqrt{1 + (ar\sin k_x h)^2} \tag{7.3.47}$$

$$\omega(k_x) = \frac{\arctan(-ar\sin k_x h)}{\Delta t} \tag{7.3.48}$$

由 (7.3.47) 可知, 当 $\beta < 0$ 时, u_m^n 将随时间无限增长, 因此格式不稳定.

□

例 5 分析 Lax-Friedrichs 差分格式 (7.1.8) 即

$$\frac{u_m^{n+1}-\frac{1}{2}(u_{m+1}^n+u_{m-1}^n)}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}=0$$

的耗散与频散关系.

解 将 $u_m^n=\hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t+k_x mh)}$ 代入该格式中, 化简得

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t}=\cos k_x h-\mathrm{i}ar\sin k_x h \tag{7.3.49}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h}$. 因此耗散和频散关系分别为

$$\begin{aligned}\beta(k_x)&=-\frac{1}{\Delta t}\ln\sqrt{\cos^2 k_x h+a^2r^2\sin^2 k_x h}\\&=-\frac{1}{\Delta t}\ln\sqrt{1-(1-a^2r^2)\sin^2 k_x h}\end{aligned} \tag{7.3.50}$$

$$\omega(k_x)=\frac{\arctan(-ar\tan k_x h)}{\Delta t} \tag{7.3.51}$$

□

例 6 分析蛙跳格式 (7.1.12) 即

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^{n-1}}{2\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}=0 \tag{7.3.52}$$

的耗散和频散关系.

解 蛙跳格式是一个三层格式, 分析也类似于两层格式, 将离散 Fourier 形式 $u_m^n=\hat{u}e^{\mathrm{i}\omega n\Delta t+k_x mh}$ 代入差分格式 (7.1.12) 中, 两端消去 $e^{\mathrm{i}(\omega n\Delta t+k_x mh)}$, 得离散的频散关系

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t}=e^{-\mathrm{i}\omega\Delta t}-r(e^{\mathrm{i}k_x h}-e^{-\mathrm{i}k_x h}) \tag{7.3.53}$$

即

$$(e^{\mathrm{i}\omega\Delta t})^2+2\mathrm{i}ar\sin(k_x h)e^{\mathrm{i}\omega\Delta t}-1=0 \tag{7.3.54}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h}$. 令 $\omega=\alpha+\mathrm{i}\beta$, 由此得

$$e^{\mathrm{i}\omega\Delta t}e^{\mathrm{i}(\alpha+\mathrm{i}\beta)\Delta t}=e^{\mathrm{i}\alpha\Delta t}e^{-\beta\Delta t}=\pm\sqrt{1-r^2\sin^2 k_x h}-\mathrm{i}ar\sin k_x h \tag{7.3.55}$$

注意 (7.3.55) 右端表达式与蛙跳格式增长矩阵的特征值 (7.1.16) 一样, 所以我们假定 $|r|<1$(当 $|r|\geqslant 1$ 时不稳定).

对波数 k_x, 蛙跳格式有两个波. 由于

$$|\mathrm{i}r\sin k_x h\pm\sqrt{1-r^2\sin^2 k_x h}|=1,\qquad k_x\in[0,\pi] \tag{7.3.56}$$

故

$$e^{-\beta\Delta t}=1,\quad \beta(k_x)=0$$

因此, 蛙跳格式没有耗散. 实离散频散关系为

$$e^{\mathrm{i}\alpha\Delta t} = \pm\sqrt{1 - a^2r^2\sin^2 k_xh} - \mathrm{i}ar\sin k_xh \tag{7.3.57}$$

或

$$\alpha_{\pm} = -\frac{1}{\Delta t}\arctan\frac{ar\sin k_xh}{\pm\sqrt{1 - a^2r^2\sin^2 k_xh}} \tag{7.3.58}$$

由 (7.3.58) 式知, 蛙跳格式有两个波速, 符号相反, 但方程 (7.1.1) 的波速为 a, 显然, 令 $\alpha_+ = -\alpha_-$ 来近似 a 是不可能的.

利用 $\dfrac{1}{\sqrt{1-z}}$ 的 Taylor 展开式

$$\frac{1}{\sqrt{1-z}} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2n-1)}{2\cdot 4\cdot 6\cdots(2n)}z^n = 1 + \frac{1}{2}z + \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{4}z^2 + \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{4}\cdot\frac{5}{6}z^3 + \cdots, \quad |z| < 1 \tag{7.3.59}$$

及 $\sin z$ 和 $\arctan z$ 的 Taylor 展开式 (7.3.21) 和 (7.3.23), 式对 (7.3.58) 式展开 (假定 k_xh 是小量), 有

$$\begin{aligned}
-\alpha_{\pm} &= \pm\frac{1}{\Delta t}\arctan\left[ar\sin k_xh\left(1 + \frac{a^2r^2\sin^2 k_xh}{2} + O((k_xh)^2)\right)\right] \\
&= \pm\frac{1}{\Delta t}\arctan\left[ar\sin k_xh + O((k_xh)^3) + \frac{a^3r^3(k_xh)^3}{2} + O((k_xh)^4)\right] \\
&= \pm\frac{1}{\Delta t}\arctan[ar\sin k_xh + O((k_xh)^3)] \\
&= \pm\frac{ark_xh}{\Delta t} = \pm k_xa + O((k_xh)^2)
\end{aligned} \tag{7.3.60}$$

因此

$$-\frac{\alpha}{k_x} = \pm a + O((k_xh)^2) \tag{7.3.61}$$

称近似传播速度的根 α_+ 为**主根**, 另一个根 α_- 为**寄生根**. 若波数 $k_x = 2\pi j, j = 0,\cdots,M-1, h = \frac{1}{M}$. 则与主根相联系的 Fourier 分量的传播速度是

$$-\frac{\alpha_+}{k_x} = a + O\left(\left(\frac{2\pi j}{M}\right)^2\right), \quad j = 0,\cdots,M-1 \tag{7.3.62}$$

与寄生根相联系的 Fourier 分量的传播速度是

$$-\frac{\alpha_-}{k_x} = -a + O\left(\left(\frac{2\pi j}{M}\right)^2\right), \quad j = 0,\cdots,M-1 \tag{7.3.63}$$

由于 $\left(\frac{2\pi j}{M}\right)^2$ 与 a 相比较小, 因此 $O\left(\left(\frac{2\pi j}{M}\right)^2\right)$ 对波速贡献不大.

□

§7.4 修正的偏微分方程

前面我们看到, Du Fort-Frankel 和 Lax-Wendroff 格式都是通过对不稳定的格式进行修正而得到的稳定的格式. 人工耗散方法就是在双曲型方程中引进一带二阶空间导数的小参数项 (耗散) 项, 使之变成带小参数的抛物型方程, 考虑偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{7.4.1}$$

的不稳定的格式

$$u_m^{n+1}=u_m^n-\frac{R}{2}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n) \tag{7.4.2}$$

其中 $R=a\frac{\Delta t}{h}$. 这是不稳定的中心差分格式, 若在 (7.4.2) 式中加进 $\delta_x u_m^n$ 一项, 则有

$$u_m^{n+1}=u_m^n-\frac{R}{2}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)+\varepsilon(u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n) \tag{7.4.3}$$

其中 ε 是待定系数. 格式 (7.4.3) 可以看成是对小参数的抛物型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{h^2\varepsilon}{\Delta t}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{7.4.4}$$

的中心差分近似的结果. 为使 (7.4.3) 与方程 (7.4.1) 相容, 必须取 $\varepsilon=\varepsilon_1\Delta t(\varepsilon_1$ 待定). 通过稳定性分析可知, 方程 (7.4.3) 的稳定性要求

$$\frac{R^2}{2}\leqslant\varepsilon\leqslant\frac{1}{2} \tag{7.4.5}$$

(1) 若取 $\varepsilon=\frac{1}{2}$, 则得 Lax-Friedrichs 格式 (7.1.8).

(2) 若取 $\varepsilon=\frac{R^2}{2}$, 则得 Lax-Wendroff 格式 (7.1.11).

(3) 若取 $\varepsilon=\frac{R}{2}$, 则得左偏心格式 (7.1.2).

(4) 若取 $\varepsilon=-\frac{R}{2}$, 则得右偏心格式 (7.1.3).

格式加进小参数的方法还可改善格式的稳定性. 对 CN 格式 (7.1.43), 可以考虑下列两个修正格式

$$u_m^{n+1}+\frac{R}{4}(u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1})=u_m^n-\frac{R}{4}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)+\varepsilon\Delta t\delta_x^2u_m^n \tag{7.4.6}$$

$$u_m^{n+1}+\frac{R}{4}(u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1})=u_m^n-\frac{R}{4}(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)-\varepsilon\Delta t\delta_x^4u_m^n \tag{7.4.7}$$

其中 $\delta_x^4u_m^n=\delta_x^2(\delta_x^2u_m^n)=u_{m+2}^n-4u_{m+1}^n+6u_m^n-4u_{m-1}^n+u_{m-2}^n$. 对蛙跳格式 (7.1.12), 考虑下面的两个修正格式

$$u_m^{n+1}=u_m^{n-1}-R(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)+\varepsilon\Delta t\delta_x^2u_m^{n-1} \tag{7.4.8}$$

$$u_m^{n+1}=u_m^{n-1}-R(u_{m+1}^n-u_{m-1}^n)-\varepsilon\Delta t\delta_x^4u_m^{n-1} \tag{7.4.9}$$

不难看出，这两个格式仍是 $O(\Delta t^2)+O(h^2)$. 可以证明，当 $\varepsilon\Delta t\leqslant\frac{1}{2}$ 时，(7.4.6) 式无条件稳定，当 $\varepsilon\Delta t\leqslant\frac{1}{8}$ 时,(7.4.7) 式无条件稳定. 对 (7.4.8) 式稳定性条件是 $R^2\leqslant 1-4\varepsilon\Delta t$, 对 (7.4.9) 式稳定性条件是 $R^2\leqslant 1-16\varepsilon\Delta t$.

如何求得修正的偏微分方程? 这可以通过分析差分方程的局部误差而得到. 我们考虑方程 (7.1.1) 的右偏心格式 (7.1.3), 即

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_m^n}{h}=0 \tag{7.4.10}$$

将上式中的 u_m^{n+1} 和 u_{m+1}^n 在点 $(mh,n\Delta t)$ 处作 Taylor 展开，得

$$\begin{aligned}0=&\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^n+\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_m^n+\frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^n+\cdots\\&+a\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n+\frac{ah}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n+\cdots\end{aligned} \tag{7.4.11}$$

建立修正偏微分方程的方法通常是保留大于原方程中导数阶的最低阶偶数阶导数项. 为了消去 (7.4.11) 式中的 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 和 $\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$. 对 (7.4.11) 式分别关于时间 t 求两次导数，得

$$\begin{aligned}0=&\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_m^n+\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^n+\frac{\Delta t^3}{6}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}\right)_m^n+\cdots\\&+a\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}\right)_m^n+\frac{ah}{2}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^3\partial t}\right)_m^n+\cdots\end{aligned} \tag{7.4.12}$$

和

$$\begin{aligned}0=&\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^n+\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}\right)_m^n+\frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial t^5}\right)_m^n+\cdots\\&+a\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial t^2}\right)_m^n+\frac{ah}{2}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^3\partial t^2}\right)_m^n+\cdots\end{aligned} \tag{7.4.13}$$

由 (7.4.12) ~ (7.4.13) 式即可得到 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ 和 $\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$ 的表达式. 由于 (7.4.12) ~ (7.4.13) 中出现 $\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}$, $\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t}$ 和 $\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial t^2}$ （到三阶）. 为了得到这些表达式，将 (7.4.11) 式分别求对 x的一、二阶偏导数和对 x 及 t 的二阶混合偏导数，得

$$\begin{aligned}0=&\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t\partial x}\right)_m^n+\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^2\partial x}\right)_m^n+\frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial t^3\partial x}\right)_m^n+\cdots\\&+a\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n+\frac{ah}{2}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_m^n+\cdots\end{aligned} \tag{7.4.14}$$

$$\begin{aligned}0=&\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t\partial x^2}\right)_m^n+\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial t^2\partial x^2}\right)_m^n+\frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial t^3\partial x^2}\right)_m^n+\cdots\\&+a\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n+\frac{ah}{2}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}\right)_m^n+\cdots\end{aligned} \tag{7.4.15}$$

和

$$0=\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t\partial x\partial t}\right)_m^n+\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial t^2\partial x\partial t}\right)_m^n+\frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial t^3\partial x\partial t}\right)_m^n+\cdots$$
$$+a\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t}\right)_m^n+\frac{ah}{2}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^3\partial t}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^4\partial t}\right)_m^n+\cdots \tag{7.4.16}$$

由 (7.4.11)~(7.4.16) 式联立可以消去 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$, $\frac{\partial^2 u}{\partial t\partial x}$, $\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$, $\frac{\partial^3 u}{\partial t^2\partial x}$ 和 $\frac{\partial^3 u}{\partial t\partial x^2}$ 项. 该过程可以用表 7.2 表示. 由表 7.2 可得修正的偏微分方程的差分格式为

$$0=\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^n+a\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n+\frac{a^2\Delta t+ah}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n+\left(\frac{a^3\Delta t^2}{3}+\frac{a^2\Delta th}{2}+\frac{ah^2}{6}\right)\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n \tag{7.4.17}$$

去掉的都是四阶及四阶以上的导数项. (7.4.17) 式可改写成

$$0=\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^n+a\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n+\frac{ah}{2}(1+r)\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}(2r+1)(r+1)\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n \tag{7.4.18}$$

表 7.2 推导修正偏微分方程的系数表

表中 (a)=(7.4.11) (b)=(7.4.12) (c)=(7.4.14) (d)=(7.4.13) (e)=(7.4.16) (f)=(7.4.15)

计算过程及方程编号	$\frac{\partial u}{\partial t}$	$\frac{\partial u}{\partial x}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial t\partial x}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$
(a)	1	a	$\frac{\Delta t}{2}$	0	$\frac{ah}{2}$	$\frac{\Delta t^2}{6}$
$(b)\times\frac{-\Delta t}{2}+(a)=(b)'$	1	a	0	$-\frac{a\Delta t}{2}$	$\frac{ah}{2}$	$\frac{\Delta t^2}{6}-\frac{\Delta t^2}{4}$
$(c)\times\frac{a\Delta t}{2}+(b)'=(c)'$	1	a	0	0	$\frac{a^2\Delta t+ah}{2}$	$\frac{\Delta t^2}{6}-\frac{\Delta t^2}{4}$
$(d)\times\frac{\Delta t^2}{12}+(c)'=(d)'$	1	a	0	0	$\frac{a^2\Delta t+ah}{2}$	0
$(e)\times\frac{-a\Delta t^2}{4}+(d)'=(e)'$	1	a	0	0	$\frac{a^2\Delta t+ah}{2}$	0
$(f)\times(\frac{a^2\Delta t^2}{3}+\frac{a\Delta th}{4})+(e)'=(f)'$	1	a	0	0	$\frac{a^2\Delta t+ah}{2}$	0

计算过程及方程编号	$\frac{\partial^3 u}{\partial t^2 \partial x}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial t \partial x^2}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}$
(a)	0	0	$\frac{ah^2}{6}$	0
$(b)\times\frac{-\Delta t}{2}+(a)=(b)'$	0	$-\frac{a\Delta th}{4}$	$\frac{ah^2}{6}$	0
$(c)\times\frac{a\Delta t}{2}+(b)'=(c)'$	$\frac{a\Delta t^2}{4}$	$-\frac{a\Delta th}{4}$	$\frac{ah^2}{6}+\frac{a^2\Delta th}{4}$	0
$(d)\times\frac{\Delta t^2}{12}+(c)'=(d)'$	$\frac{a\Delta t^2}{12}+\frac{a\Delta t^2}{4}$	$-\frac{a\Delta th}{4}$	$\frac{ah^2}{6}+\frac{a^2\Delta th}{4}$	0
$(e)\times\frac{-a\Delta t^2}{4}+(d)'=(e)'$	0	$-\frac{a^2\Delta t^2}{3}-\frac{a\Delta th}{4}$	$\frac{ah^2}{6}+\frac{a^2\Delta th}{4}$	0
$(f)\times(\frac{a^2\Delta t^2}{3}+\frac{a\Delta th}{4})+(e)'=(f)'$	0	0	$\frac{a^3\Delta t^2}{3}+\frac{a^2\Delta th}{2}+\frac{ah^2}{6}$	0

其中 $r=a\frac{\Delta t}{h}$. 因此与格式 (7.4.10) 相对应的修改的偏微分方程是

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{ah}{2}(1+r)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{ah^2}{6}(2r+1)(r+1)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}=0 \tag{7.4.19}$$

下面的例子将看到, 差分方程 (7.4.10) 的解性质与 (7.4.19) 解的性质非常类似.

在 (7.4.19) 式中出现了 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 项 (偶数阶导数) 和 $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ 项 (奇数阶导数). 一般地, 当有空间偶数阶导数项时, 例如

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=A_2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+A_4\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \tag{7.4.20}$$

可用分离变量法求得该式的解. 将 $u(x,t)=\hat{u}e^{\mathrm{i}(\omega t+k_x x)}$ 代人上式中得频散关系为

$$\omega(k_x)=-ak_x+\mathrm{i}(A_2k_x^2-A_2k_x^4) \tag{7.4.21}$$

所以 (7.4.20) 式的解可以表示为

$$u(x,t)=\hat{u}e^{-A_2k_x^2t}e^{A_4k_x^4t}e^{\mathrm{i}k_x(x-at)} \tag{7.4.22}$$

其中 k_x 是空间波数. 由上式知, 偶数阶导数项只改变波的振幅 (数值耗散), 不改变波的速度和相位. 为保持不同波数时振幅有界, 必须要求 $A_2>0$, $A_4<0$, 从而使振幅随时间增加而衰减. 一般地, 为使振幅不增长, 要求 $A_{2m}(m=1,2\cdots)$ 的正负号满足

$$A_{2m}=(-1)^{m+1}|A_{2m}|, \qquad m=1,2,\cdots \tag{7.4.23}$$

这是判定修正方程的差分格式是否稳定的标准, 称为**Hint 稳定判别法**. 当在方程中加进人工粘性项时, 其系数的正负号必须满足 (7.4.23)式.

另一方面, 若修正方程中出现空间奇数阶导数项时, 例如

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=A_3\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}+A_4\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} \tag{7.4.24}$$

则类似可得频散关系

$$\omega(k_x) = -ak_x - A_3k_x^3 - A_4k_x^5 \tag{7.4.25}$$

所以方程的解为

$$u(x,t) = \hat{u}e^{\mathrm{i}k_x[x-(a+A_3k_x^2+A_4k_x^4)t]} \tag{7.4.26}$$

从而可知波的振幅没有改变, 但波速由 a 变为 $a + A_3k_x^2 + A_4k_x^4$, 这表现不同的波数 k_x 有不同的波速, 出现相位差, 导致**频散现象**.

在求解偏微分方程时, 解的耗散有两种, 一种是方程本身有耗散项存在, 即方程本身有偶数阶导数项, 称为**物理耗散**, 另一种是, 由于数值离散时, 截断误差中存在的偶数项导数项的影响, 称为**数值耗散**, 是**非物理耗散**.

修正方程的截断误差中的奇数阶导数项是频散项, 长波频散小, 短波频散大, 频散会导致解振荡, 但并不导致解的发散.

例 1 分析修正偏微分方程 (7.4.19) 的耗散和频散关系.

解 对形如

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} - b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \tag{7.4.27}$$

的方程, 易知频散关系为

$$\omega(k_x) = -ak_x + ck_x^3 + \mathrm{i}bk_x^2 \tag{7.4.28}$$

波数为 k_x 的分量的解为

$$u(x,t) = \hat{u}e^{-bk_x^2}e^{\mathrm{i}k_x[x-(a-ck_x^2)t]} \tag{7.4.29}$$

在方程中的耗散项是 $e^{-bk_x^2t}$, 波数为 k_x 的分量的波的传播速度是 $a - ck_x^2$. 对方程 (7.4.19),

$$b = -\frac{ah}{2}(1+r), \quad c = \frac{ah^2}{6}(2r+1)(r+1) \tag{7.4.30}$$

注意, 若 $a > 0$(从而 $r = \frac{a\Delta t}{h} > 0$), 则振幅随时间层 n 增长而放大, 不稳定, 因此必须假定 $a < 0$. 再由 $1 + r \geqslant 0$ 知 $-1 \leqslant r < 0$. 对修正的方程, 由 (7.3.13) 式知,

$$\begin{aligned}\beta &= -\frac{1}{2\Delta t}\ln\left[\,(1+r)^2 - 2r(1+r)\cos k_xh + r^2\,\right] \\ &= -\frac{1}{2\Delta t}\ln\left\{\,1 - [-2r(1+r) + 2r(1+r)\cos k_xh]\,\right\}\end{aligned} \tag{7.4.31}$$

利用 $\ln(1-z)$ 和 $\cos z$ 的 Taylor 展开式

$$\ln(1-z) = -z - \frac{z^2}{2} - \frac{z^3}{3} - \cdots - \frac{z^{n+1}}{n+1} -, \quad -1 \leqslant z < 1 \tag{7.4.32}$$

$$\cos z = 1 - \frac{z^2}{2!} + \frac{z^4}{4!} - \cdots + (-1)^n\frac{z^{2n}}{(2n)!} + \cdots, \quad z \in (-\infty, +\infty) \tag{7.4.33}$$

可将 (7.4.31) 式写成

$$
\begin{aligned}
\beta &\approx -\frac{1}{2\Delta t}\left\{2r(1+r)-2r(1+r)(1-\frac{k_x^2h^2}{2}+\cdots)-\cdots\right\}\\
&\approx -\frac{1}{2\Delta t}r(1+r)k_x^2h^2\\
&= -\frac{ah}{2}(1+r)k_x^2 = ak_x^2
\end{aligned}
\tag{7.4.34}
$$

可以看到, 修正的偏微分方程的耗散项是精确耗散关系的 Taylor 展开的第一项, 而修正方程差分格式的传播速度 $a-\frac{ah^2}{6}(2r+1)(r+1)k_x^2$ 是 $-\frac{\alpha}{k_x}$ 的渐近展开, 见 (7.3.26)式.

例 2　考虑差分格式

$$
\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+\frac{a}{2}\frac{u_{m+1}^{n+1}-u_{m-1}^{n+1}}{2h}+\frac{a}{2}\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{h}=0 \tag{7.4.35}
$$

的修正偏微分方程.

解　(7.4.35) 式是方程 (7.4.1) 的 CN 格式. 将该格式中的 u 在点 $(mh,\frac{n+1}{2}\Delta t)$ 处展成 Taylor 级数, 整理后得

$$
\begin{aligned}
0 = &\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^{n+\frac12}+\frac{\Delta t^2}{24}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^{n+\frac12}\\
&+a\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^{n+\frac12}+\frac{\Delta t^2}{8}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial t^2}\right)_m^{n+\frac12}+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^{n+\frac12}+O(5)
\end{aligned}
\tag{7.4.36}
$$

其中 $O(5)$ 表示 5 阶及 5 阶以上的高阶导数项. 在最后的方程中, 要包含 $\frac{\partial u}{\partial t}$ 项, $\frac{\partial u}{\partial x}$ 或其高阶导数项, 不包含 u 关于 t 的任何其他导数项. 我们建立如下系数表 7.3, 其中第一行是方程 (7.4.36) 中各阶导数的系数; 第二行 (b) 通过计算消去第一行 (a) 的 $\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$ 项; 第三项 (c) 消去第二行 (b) 中的 $\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial t^2}$ 项; 第四行 (d) 消去第三行 (c) 中的 $\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t}$ 项, 表 7.3 中的四阶导数项均为零.

表 7.3　推导修正偏微分方程的系数表

计算过程及方程编号	$\frac{\partial u}{\partial t}$	$\frac{\partial u}{\partial x}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial t^2}$
(a)	1	a	0	0	0	$\frac{\Delta t^2}{24}$	$\frac{a\Delta t^2}{8}$
$-\frac{\Delta t^2}{24}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(a)+(a)=(b)$	1	a	0	0	0	0	$\frac{a\Delta t^2}{12}$
$-\frac{a\Delta t^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x\partial t}(a)+(b)=(c)$	1	a	0	0	0	0	0
$\frac{a\Delta t^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a)+(c)=(d)$	1	a	0	0	0	0	0

计算过程及方程编号	$\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x\partial t^3}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x^3\partial t}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$
(a)	0	$\frac{ah^2}{6}$	0	0	0	0	0
$-\frac{\Delta t^2}{24}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(a)+(a)=(b)$	0	$\frac{ah^2}{6}$	0	0	0	0	0
$-\frac{a\Delta t^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x\partial t}(a)+(b)=(c)$	$-\frac{a^2\Delta t^2}{12}$	$\frac{ah^2}{6}$	0	0	0	0	0
$\frac{a\Delta t^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a)+(c)=(d)$	0	$\frac{a^2\Delta t^2}{12}+\frac{ah^2}{6}$	0	0	0	0	0

由表中的最后一行得修正偏微分方程

$$0=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{ah^2}{12}(2+r^2)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \tag{7.4.37}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h}$.

例 3 考虑 Lax-Wendroff 格式 (7.1.23) 式, 即

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}-\frac{a^2\Delta t}{2}\frac{u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n}{h^2}=0 \tag{7.4.38}$$

的修正偏微分方程.

解 将 u 在 $(mh,n\Delta t)$ 处展开成 Taylor 级数后代入 Lax-Wendroff 格式中, 整理得

$$\begin{aligned}
0=&\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}+a\frac{u_{m+1}^n-u_{m-1}^n}{2h}-\frac{a^2\Delta t}{2}\frac{u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n}{h^2}\\
=&\frac{1}{\Delta t}\left(\Delta t\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}+\frac{\Delta t^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}+\frac{\Delta t^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}+\frac{\Delta t^5}{120}\frac{\partial^5 u}{\partial t^5}+\cdots\right)_m^n\\
&+\frac{a}{2h}\left(2h\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{h^3}{3}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}+\frac{h^5}{60}\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}+\cdots\right)_m^n\\
&-\frac{a^2\Delta t}{2h^2}\left(h^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{h^4}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{h^6}{120}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}+\cdots\right)_m^n\\
=&\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_m^n+a\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_m^n+\left[\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_m^n-\frac{a^2\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m^n\right]\\
&+\frac{\Delta t^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_m^n+\frac{ah^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_m^n+\frac{\Delta t^3}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+O(5)
\end{aligned} \tag{7.4.39}$$

其中方括号部分为零, $O(5)$ 表示 5 阶和 5 阶以上的导数项. 建立系数表 7.4.

由第 (d) 行可得 Lax-Wendroff 格式的修正偏微分方程

$$0=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{ah^2}{6}(1-r^2)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \tag{7.4.40}$$

由第 (h) 行可得含有四阶导数的修正偏微分方程

$$0=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{ah^2}{6}(1-r^2)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}-\frac{ah^2}{24}r(1-r^2)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \tag{7.4.41}$$

表 7.4　推导 Lax-Wendroff 格式的修正偏微分方程的系数表

计算过程及方程编号	$\frac{\partial u}{\partial t}$	$\frac{\partial u}{\partial x}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial t^2}$	$\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t}$
(a)	1	a	0	0	0	$\frac{\Delta t^2}{6}$	0	0
$-\frac{\Delta t^2}{6}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(a)+(a)=(b)$	1	a	0	0	0	0	$-\frac{a\Delta t^2}{6}$	0
$\frac{a\Delta t^2}{6}\frac{\partial^2}{\partial x\partial t}(a)+(b)=(c)$	1	a	0	0	0	0	0	$\frac{a^2\Delta t^2}{6}$
$\frac{a^2\Delta t^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a)+(c)=(d)$	1	a	0	0	0	0	0	0
$-\frac{\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial t^3}(a)+(d)=(e)$	1	a	0	0	0	0	0	0
$\frac{a\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial x\partial t^2}(a)+(e)=(f)$	1	a	0	0	0	0	0	0
$-\frac{a^2\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial x^2\partial t}(a)+(f)=(g)$	1	a	0	0	0	0	0	0
$\frac{a^2\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial t^3}(a)+(g)=(h)$	1	a	0	0	0	0	0	0

计算过程及方程编号	$\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x\partial t^3}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x^3\partial t}$	$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$
(a)	$\frac{ah^2}{6}$	$\frac{\Delta t^3}{24}$	0	0	0	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}$
$-\frac{\Delta t^2}{6}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(a)+(a)=(b)$	$\frac{ah^2}{6}$	$\frac{\Delta t^3}{23}$	0	0	0	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}$
$\frac{a\Delta t^2}{6}\frac{\partial^2}{\partial x\partial t}(a)+(b)=(c)$	$\frac{ah^2}{6}$	$\frac{\Delta t^3}{24}$	0	0	0	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}$
$\frac{a^2\Delta t^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a)+(c)=(d)$	$\frac{ah^2}{6}-\frac{a^3\Delta t^2}{6}$	$\frac{\Delta t^3}{24}$	0	0	0	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}$
$-\frac{\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial t^3}(a)+(d)=(e)$	$\frac{ah^2}{6}-\frac{a^3\Delta t^2}{6}$	0	$-\frac{a\Delta t^3}{24}$	0	0	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}$
$\frac{a\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial x\partial t^2}(a)+(e)=(f)$	$\frac{ah^2}{6}-\frac{a^3\Delta t^2}{6}$	0	0	$\frac{a^2\Delta t^3}{24}$	0	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}$
$-\frac{a^2\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial x^2\partial t}(a)+(f)=(g)$	$\frac{ah^2}{6}-\frac{a^3\Delta t^2}{6}$	0	0	0	$\frac{a^3\Delta t^3}{24}$	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}$
$\frac{a^2\Delta t^3}{24}\frac{\partial^3}{\partial t^3}(a)+(g)=(h)$	$\frac{ah^2}{6}-\frac{a^3\Delta t^2}{6}$	0	0	0	0	$-\frac{a^2h^2\Delta t}{24}+\frac{a^4\Delta t^3}{24}$

§7.5 KDV 方程的差分格式

KdV 方程是 Korteweg-de Vries 方程的简称, 最初出现于浅水波的研究中, 用来描述流体中的单向波传播的数学模型, 后来人们认识到 KdV(Korteweg, de Vries,1985) 方程可用来描述等离子体中的磁流波和离子声波, 液、气混合物中的压力波等各种物理现象, 是一种基本的非线性动力学方程.

一维 KDV 方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\alpha u\frac{\partial u}{\partial x}+\beta\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}=0 \tag{7.5.1}$$

它具有频散的特性, 许多常见的格式均可用来计算.

1. 蛙跳格式

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^{n-1}}{\Delta t}+\alpha\bar{u}_m^n\delta_x^0\frac{u_m^n}{h}+\beta\frac{\delta_x^0(u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n)}{h^3}=0 \tag{7.5.2}$$

其中 $\bar{u}_m^n=\frac{1}{3}(u_{m+1}^n+u_m^n+u_{m-1}^n)$, δ_x^0 是中心差分算子即 $\delta_x^0=u_{m+1}^n-u_{m-1}^n$, 截断误差为 $O(\Delta t^2+h^2)$. 稳定性条件为

$$r\max\left(\alpha|u|+\frac{4\beta}{h^2}\right)\leqslant 1 \tag{7.5.3}$$

这里 $r=\dfrac{\Delta t}{h}$.

2. 跳点格式

当 $m+n=$ 偶数时

$$u_m^{n+1}=u_m^n-\frac{1}{2}r\alpha\delta_x^0 f_m^n-\frac{1}{2}\frac{r\beta}{h^2}\delta_x^0(u_{m+1}^n-2u_m^n+u_{m-1}^n) \tag{7.5.4}$$

当 $m+n=$ 奇数时

$$u_m^{n+1}=u_m^n-\frac{1}{2}r\alpha\delta_x^0 f_m^{n+1}-\frac{1}{2}\frac{r\beta}{h^2}\delta_x^0(u_{m+1}^{n+1}-2u_m^{n+1}+u_{m-1}^{n+1}) \tag{7.5.5}$$

其中 $f=\frac{u^2}{2}$. 格式具有二阶精度, 稳定性条件为

$$r\left|\alpha u-\frac{2\beta}{h^2}\right|\leqslant 1 \tag{7.5.6}$$

3. 分裂格式

将对流项和频散项分裂后独立计算. 对流方程 $\dfrac{\partial u}{\partial t}+\alpha u\dfrac{\partial u}{\partial x}=0$ 可用迎风格式或 Lax 等耗散格式, 频散方程 $\dfrac{\partial u}{\partial t}+\beta\dfrac{\partial^3 u}{\partial x^3}=0$ 可取一般格式如中心差分格式、CN 格式等. 例如对流方程取 Lax 格式, 频散方程取时间前差空间中心差分的格式, 则得

$$\begin{aligned}\bar{u}_m^n&=\frac{1}{2}(u_{m+1}^n+u_{m-1}^n)-\frac{1}{2}r\alpha(f_{m+1}^n-f_{m-1}^n)\\ u_m^{n+1}&=u_m^n-\frac{1}{2}\frac{\beta r}{h^2}\delta_x^0(\bar{u}_{m+1}^n-2\bar{u}_m^n+\bar{u}_{m-1}^n)\end{aligned} \tag{7.5.7}$$

精度为 $O(\Delta t+h^2)$. 稳定性条件用 (7.5.3)式. 当 β 较大时, 频散项 $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ 起重要作用, 如该项用显式格式, 要求 $\Delta t\sim\Delta x^3$, 而用全隐式增加计算量, 为此可采用半隐式格式

$$u_m^{n+1}=u_m^n-\frac{1}{2}\alpha r\delta_x^0 f_m^n-\frac{1}{2}\frac{\beta r}{h^2}[u_{m+2}^n-(u_{m+1}^n+u_{m+1}^{n-1})+(u_{m-1}^{n+1}+u_{m-1}^{n-1})-u_{m-2}^n] \tag{7.5.8}$$

这是一个三层隐式格式, 稳定性条件为

$$r\alpha|u|\leqslant 1 \tag{7.5.9}$$

§7.6 一阶双曲型方程组

§7.6.1 特征形式

考虑

$$\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{\partial F(U)}{\partial x}=Q \tag{7.6.1}$$

或

$$\frac{\partial U}{\partial t}+A\frac{\partial U}{\partial x}=Q \tag{7.6.2}$$

其中 $U=(u_1,u_2,\cdots,u_M)^T$ 是列向量, $F(U)$ 是 U 的函数, $A=\frac{\partial F}{\partial U}$ 是 Jacobi 矩阵. 如果上述方程是**双曲型方程组**，则 A 是 $M\times M$ 矩阵, 且有 M 个线性独立的实特征值 $\lambda_1,\cdots,\lambda_m$, 从而必存在一个非奇异矩阵 P, 使得

$$\Lambda=P^{-1}AP=\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_M\end{bmatrix} \tag{7.6.3}$$

于是可将方程 (7.6.2) 化成**特征型方程组**

$$P\frac{\partial U}{\partial t}+\Lambda P\frac{\partial U}{\partial x}=PQ \tag{7.6.4}$$

矩阵 P 的元素 p_{ij} 可由左特征值对应的特征行向量 (**左特征向量**) 构成, 或由右特征值对应的特征列向量 (**右特征向量**) 构成. 只有双曲方程组才有可能化成特征型, (7.6.4) 的分量形式为

$$\sum_{j=1}^{M}p_{ij}\left(\frac{\partial u_j}{\partial t}+\lambda_i\frac{\partial u_j}{\partial x}-q_i\right)=0,\quad i=1,2,\cdots,M \tag{7.6.5}$$

其特征线为

$$\frac{dx_i}{dt}=\lambda_i,\quad i=1,2,\cdots,M \tag{7.6.6}$$

可以证明, 方程组 (7.6.2) 的解的小扰动在 x,t 平面上是沿 M 族特征线传播的, 也即小扰动以特征速度 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_M$ 传播. 当 $\lambda_i>0$ 时向 $+x$ 方向传播, 当 $\lambda_i<0$ 时向 $-x$ 方向传播. 根据特征线, 可以明确边界条件的提法. 若求解区域为 $0\leqslant x\leqslant X, 0\leqslant t\leqslant T$, 在左边界 $x=0$ 处, 设 λ_i 中有 r 个为正, 则在左边界上特征线有 r 条在界外, r 个特征关系失效, 这时应在左边界补充 r 个边界条件; 反之, 在右边界 $x=X$ 处, 若 λ_i 中有 s 个为负, 则边界上有 s 条特征线, 在右边界处, 这 s 个特征关系失效, 这时应补充 s 个右边界条件.

例 1 将一维定常无粘性流动

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t}+u\dfrac{\partial \rho}{\partial x}+\rho\dfrac{\partial u}{\partial x}=0\\
\dfrac{\partial u}{\partial t}+u\dfrac{\partial u}{\partial x}+\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial p}{\partial x}=0\\
\dfrac{\partial \rho}{\partial t}+\rho c^2\dfrac{\partial u}{\partial x}+u\dfrac{\partial p}{\partial x}=0
\end{cases}
\tag{7.6.7}
$$

化成特征型方程组, 其中 c 为音速, ρ 为密度, p 为压力, u 为速度.

解 方程 (7.6.7) 可写成

$$\frac{\partial U}{\partial t}+A\frac{\partial U}{\partial x}=0 \tag{7.6.8}$$

其中

$$U=\begin{bmatrix}\rho\\ u\\ p\end{bmatrix},\quad A=\begin{bmatrix}u & \rho & 0\\ 0 & u & \frac{1}{\rho}\\ 0 & \rho c^2 & u\end{bmatrix} \tag{7.6.9}$$

矩阵 A 的特征值为

$$\lambda_i=u-c,\quad \lambda_2=u,\quad \lambda_3=u+c \tag{7.6.10}$$

对应的特征行向量为

$$l_1=(0,-\rho c,1),\quad l_2=(-c^2,0,1),\quad l_3=(0,\rho c,1) \tag{7.6.11}$$

于是

$$\Lambda=\begin{bmatrix}u-c & 0 & 0\\ 0 & u & 0\\ 0 & 0 & u+c\end{bmatrix},\quad P=\begin{bmatrix}0 & -\rho c & 1\\ -c^2 & 0 & 1\\ 0 & \rho c & 1\end{bmatrix} \tag{7.6.12}$$

由于

$$l_iA=\lambda_i l_i,\quad i=1,2,3 \tag{7.6.13}$$

用 l_i 左乘 (7.6.8) 式得

$$\sum_{j=1}^{3}p_{ij}\left(\frac{\partial u_j}{\partial t}+\lambda_i\frac{\partial u_j}{\partial x}\right)=0,\quad i=1,2,3 \tag{7.6.14}$$

因此特征型方程组为

$$
\begin{cases}
-\rho c\left(\dfrac{\partial}{\partial t}+(u-c)\dfrac{\partial}{\partial x}\right)u+\left(\dfrac{\partial}{\partial t}+(u-c)\dfrac{\partial}{\partial x}\right)\rho=0\\
-c^2\left(\dfrac{\partial}{\partial t}+u\dfrac{\partial}{\partial x}\right)\rho+\left(\dfrac{\partial}{\partial t}+u\dfrac{\partial}{\partial x}\right)p=0\\
\rho c\left[\dfrac{\partial}{\partial t}+(u+c)\dfrac{\partial}{\partial x}\right]u+\left[\dfrac{\partial}{\partial t}+(u+c)\dfrac{\partial}{\partial x}\right]p=0
\end{cases}
\tag{7.6.15}
$$

例 2 将二阶方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u^2\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \tag{7.6.16}$$

化成特征型方程组.

解 令 $\frac{\partial u}{\partial t} = f$, $\frac{\partial u}{\partial x} = g$, 则 (7.6.16) 式可写成

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A\frac{\partial U}{\partial x} = 0 \tag{7.6.17}$$

其中

$$U = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}, \qquad A = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{u^2} \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

矩阵 A 的特征值为

$$\lambda_1 = \frac{1}{u}, \quad \lambda_2 = -\frac{1}{u}$$

对应的特征行向量分别为

$$l_1 = (u, -1), \quad l_2 = (u, 1)$$

从而

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \frac{1}{u} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{u} \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} u & -1 \\ u & 1 \end{bmatrix} \tag{7.6.18}$$

因此由 (7.6.14) 知特征型方程组为

$$\begin{cases} u\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{u}\frac{\partial}{\partial x}\right) f - \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{u}\frac{\partial}{\partial x}\right) g = 0 \\ u\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{u}\frac{\partial}{\partial x}\right) f + \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{u}\frac{\partial}{\partial x}\right) g = 0 \end{cases} \tag{7.6.19}$$

§7.6.2 差分格式

前面讨论的对流方程的差分格式均可用于一阶双曲型方程组.

1. 特征型差分格式 (一阶迎风格式)

沿特征线上的网格对特征型方程组的每个方程分别差分. 如采用迎风差分格式, 则 (7.6.5) 式的差分格式为

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^{M}(p_{ij})_m^n\Big[\frac{(u_j)_m^{n+1} - (u_j)_m^n}{\Delta t} + \lambda_j\frac{(u_j)_{m+1}^n - (u_j)_{m-1}^n}{2h} \\ &+|\lambda_i|\frac{(u_j)_{m+1}^n - 2(u_j)_m^n + (u_j)_{m-1}^n}{2h} - (q_i)_m^n\Big] = 0, \quad i = 1, \cdots, M \end{aligned} \tag{7.6.20}$$

其精度为一阶. 为求解未知量 $(u_j)_m^{n+1}, j = 1, \cdots, M$, 需要求解联立方程组. 当 $\lambda_j \geqslant 0$ 时, (7.6.20) 式即为左偏心格式, 当 $\lambda_j < 0$ 时, 为右偏心格式. CFL 条件为 $\Delta t <$

$\frac{h}{\max|\lambda_j|}$. 其中 λ_j 为特征值. 将对流方程的一些主要格式用于方程 (7.6.1) 可得如下的一些格式.

2. 中心差分显格式

$$\frac{U_m^{n+1}-U_m^n}{\Delta t}+\frac{F(U_{m+1}^n)-F(U_{m-1}^n)}{2h}=Q_m^n \tag{7.6.21}$$

其精度为 $O(\Delta t+h^2)$, 绝对稳定.

3. 中心差分隐格式

$$\frac{U_m^{n+1}-U_m^n}{\Delta t}+\frac{F(U_{m+1}^{n+1})-F(U_{m-1}^{n+1})}{2h}=Q_m^{n+1} \tag{7.6.22}$$

其精度为 $O(\Delta t+h^2)$, 绝对稳定.

4. Lax-Wnedroff 格式

根据 Taylor 展开

$$U_m^{n+1}=U_m^n+\Delta t\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_m^n+\frac{\Delta t^2}{2}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}\right)_m^n+O(\Delta t^3) \tag{7.6.23}$$

又由 (7.6.1) 式得

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}=-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)=-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial U}\frac{\partial U}{\partial t}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(A\frac{\partial F}{\partial x}\right) \tag{7.6.24}$$

代入 (7.6.23) 式并略去高阶量, 得Lax-wendroff格式

$$U_m^{n+1}=U_m^n-\Delta t\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_m^n+\frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left(A\frac{\partial F}{\partial x}\right)_m^n \tag{7.6.25}$$

将 $\frac{\partial F}{\partial x}$ 及 $\frac{\partial}{\partial x}\left(A\frac{\partial F}{\partial x}\right)$ 均以中心差分近似, 得

$$U_m^{n+1}=U_m^n-\frac{\Delta t}{2h}(F_{m+1}^n-F_{m-1}^n)+\frac{\Delta t^2}{2h^2}[A_{m+\frac{1}{2}}^n(F_{m+1}^n-F_m^n)-A_{m-\frac{1}{2}}^n(F_m^n-F_{m-1}^n)] \tag{7.6.26}$$

其中 $A_{m\pm\frac{1}{2}}^n$ 可取

$$\begin{aligned}A_{m\pm\frac{1}{2}}^n&=A(U_{m\pm\frac{1}{2}}^n)\\U_{m\pm\frac{1}{2}}^n&=\frac{1}{2}(U_m^n+U_{m\pm1}^n)\end{aligned} \tag{7.6.27}$$

或

$$A_{m\pm\frac{1}{2}}^n=\frac{1}{2}(A_m^n+A_{m\pm1}^n) \tag{7.6.28}$$

精度为 $O(\Delta t^2+h^2)$, 稳定性条件为 $\Delta t<\frac{h}{\max|\lambda_i|}$.

5. Lax-Friedrichs 格式

$$\frac{U_m^{n+1}-U_m^n}{\Delta t}+\frac{F(U_{m+1}^n)-F(U_{m-1}^n)}{2h}-\frac{\Delta t(U_{m-1}^n-2U_m^n+U_{m+1}^n)}{2h^2}=Q_m^n \tag{7.6.29}$$

精度为 $O(\Delta t+h^2)$, 稳定性条件为 $\Delta t<\frac{h}{\max|\lambda_i|}$.

6. 两步 Lax-Wendroff 格式

$$\begin{cases}U_m^{n+1}=\frac{1}{2}(U_{m+1}^n+U_{m-1}^n)-\frac{\Delta t}{2h}(F_{m+1}^n-F_{m-1}^n)\\ U_m^{n+2}=U_m^n-\frac{\Delta t}{h}(F_{m+1}^{n+1}-F_{m-1}^{n+1})\end{cases} \tag{7.6.30}$$

7. MacCormack 格式

采用两步预测校正格式

预测

$$\bar{U}_m^{n+1}=U_m^n-\frac{\Delta t}{h}(F_{m+1}^n-F_m^n) \tag{7.6.31}$$

校正

$$\tilde{U}_m^{n+1}=\bar{U}_m^{n+1}-\frac{\Delta t}{h}(\bar{F}_m^{n+1}-\bar{F}_{m-1}^{n+1}) \tag{7.6.32}$$

计算

$$U_m^{n+1}=\frac{U_m^n+\tilde{U}_m^{n+1}}{2} \tag{7.6.33}$$

预测步也可用空间前差. 当 (7.6.2) 式中的 A 为常数矩阵时, 格式 (7.6.31)~ (7.6.33) 可写成

预测

$$\bar{U}_m^{n+1}=U_m^n-\frac{\Delta t}{h}A(U_{m+1}^n-U_m^n) \tag{7.6.34}$$

校正

$$\tilde{U}_m^{n+1}=\bar{U}_m^{n+1}-\frac{\Delta t}{h}A(\bar{U}_m^{n+1}-\bar{U}_{m-1}^{n+1}) \tag{7.6.35}$$

计算

$$U_m^{n+1}=\frac{U_m^n+\tilde{U}_m^{n+1}}{2} \tag{7.6.36}$$

不难验证, 这时格式即为 Lax-Wendroff 格式 (7.6.26) 在 A 为常数时的特例, 即

$$U_m^{n+1}=U_m^n-\frac{\Delta tA}{2h}(U_{m+1}^n-U_{m-1}^n)+\frac{\Delta t^2A^2}{2h^2}(U_{m+1}^n-2U_m^n+U_{m-1}^n) \tag{7.6.37}$$

8. 交错网格法

对于含有多个未知函数, 可以构造交错网格差分格式, 例如对两个未知数的方程组

$$\begin{cases}\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial v}{\partial x}=f\\ \frac{\partial v}{\partial t}-a\frac{\partial u}{\partial x}=g\end{cases} \tag{7.6.38}$$

其中 $a>0$. 可以将 u,v,f,g 放在不同类型的结点上, 如

$$u^n_{m+\frac{1}{2}},\quad v^{n+\frac{1}{2}}_m,\quad f^{n+\frac{1}{2}}_{m+\frac{1}{2}},\quad g^{n+1}_m$$

然后对两个方程分别用菱形差分格式, 得到

$$\begin{cases}\dfrac{1}{\Delta t}(u^{n+1}_{m+\frac{1}{2}}-u^n_{m+\frac{1}{2}})-\dfrac{a}{h}(v^{n+\frac{1}{2}}_{m+1}-v^{n+\frac{1}{2}}_m)=f^{n+\frac{1}{2}}_{m+\frac{1}{2}}\\ \dfrac{1}{\Delta t}(v^{n+\frac{1}{2}+1}_m-v^{n+\frac{1}{2}}_m)-\dfrac{a}{h}(u^{n+1}_{m+\frac{1}{2}}-u^{n+1}_{m-\frac{1}{2}})=g^{n+1}_m\end{cases}\tag{7.6.39}$$

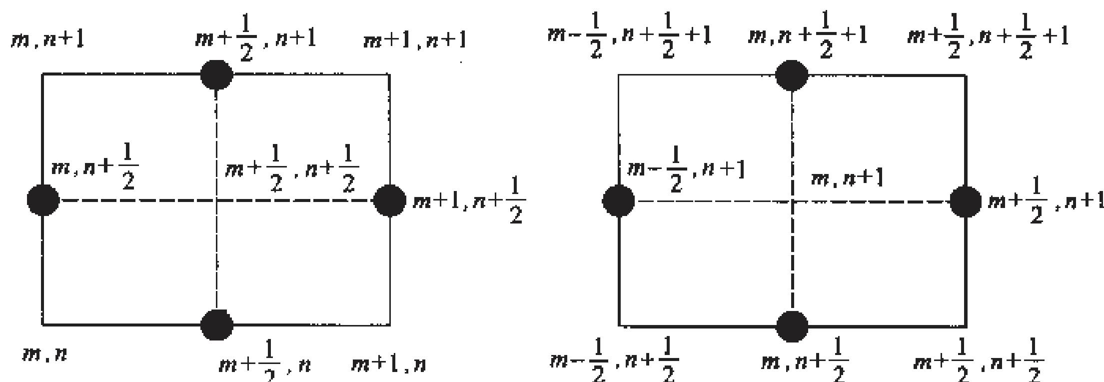


图 7.7　交错网格差分格式的网格点

网格点如图 7.7 所示, 其中第一个方程在 $\left(m+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}\right)$ 处建立差分格式, 第二个方程在 $(m,n+1)$ 处建立差分格式, 系数矩阵的特征方程是

$$\lambda^2+\left(4\frac{a^2\Delta t^2}{h^2}-2\right)\lambda+1=0\tag{7.6.40}$$

由此得稳定性条件为 $\frac{\Delta t}{h}\leqslant\frac{1}{a}$. 若方程在 (m,n) 处上用菱形公式, 仍有同样的精度与稳定性, 但是三层格式.

§7.7 二维双曲型方程

考虑二维双曲型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a_1\frac{\partial u}{\partial x}+a_2\frac{\partial u}{\partial y}=0\tag{7.7.1}$$

通常假定 x,y 的网格步长相等, $\Delta x=\Delta y=h$. 分别用下标 j,m,n 表示 x,y,t 的网格点指标.

1. *FFF* 型显式格式 $(a_1>0,a_2>0)$

一阶偏导数均用向前差商近似

$$u^{n+1}_{j,m}=(1-r_1\delta^+_x-r_2\delta^+_y)u^n_{j,m}\tag{7.7.2}$$

其中 $r_1 = a_1\frac{\Delta t}{h}$, $r_2 = a_2\frac{\Delta t}{h}$, δ_x^+ 和 δ_y^+ 分别为 x 和 y 方向的一阶向前差分算子, 即

$$\begin{aligned}\delta_x^+ u_{j,m}^n &= u_{j+1,m}^n - u_{j,m}^n \\ \delta_y^+ u_{j,m}^n &= u_{j,m+1}^n - u_{j,m}^n\end{aligned} \tag{7.7.3}$$

格式 (7.7.2) 的精度为 $O(\Delta t + h)$. 令 $u_{j,m}^n = v^n e^{i(\sigma_1 jh + \sigma_2 mh)}$, 代入 (7.7.2) 式中得

$$\begin{aligned}v^{n+1} &= [1 - r_1(e^{i\sigma_1 h} - 1) - r_2(e^{i\sigma_2 h} - 1)]v^n \\ &= [1 + r_1(1 - \cos\sigma_1 h) + r_2(1 - \cos\sigma_2 h) - i(r_1 \sin\sigma_1 h + r_2 \sin\sigma_2 h)]v^n\end{aligned} \tag{7.7.4}$$

于是增长因子为

$$G = 1 + r_1(1 - \cos\sigma_1 h) + r_2(1 - \cos\sigma_2 h) - i(r_1 \sin\sigma_1 h + r_2 \sin\sigma_2 h) \tag{7.7.5}$$

由 $|G| \leqslant 1$ 解得稳定性条件为 $r_1 + r_2 \leqslant 1$. 当 $r_1 = r_2$ 时, 为 $r_1 = r_2 \leqslant \frac{1}{2}$.

2. Lax-Friedrich 格式

$$\begin{aligned}&\frac{u_{j,m}^n - \frac{1}{4}(u_{j,m+1}^n + u_{j,m-1}^n + u_{j+1,m}^n + u_{j-1,m}^n)}{\Delta t} + \\ &a_1 \frac{u_{j+1,m}^n - u_{j-1,m}^n}{2h} + a_2 \frac{u_{j,m+1}^n - u_{j,m-1}^n}{2h} = 0\end{aligned} \tag{7.7.6}$$

也是一阶精度格式, 增长因子为

$$G = \frac{1}{2}(\cos\sigma_1 h + \cos\sigma_2 h) - i(r_1 \sin\sigma_1 h + r_2 \sin\sigma_2 h) \tag{7.7.7}$$

稳定性条件为 $r_1^2 + r_2^2 \leqslant \frac{1}{2}$, 这比一维 Lax-Wendroff 格式 (7.1.8) 的稳定性条件严格.

3. Lax-Wendroff 格式

将 Taylor 展开式 (假定方程 (7.7.1) 的解充分光滑)

$$u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n + \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{j,m}^n + \frac{\Delta t^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_{j,m}^n + O(\Delta t^3) \tag{7.7.8}$$

中的时间导数用空间导数代替

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a_1 \frac{\partial u}{\partial x} - a_2 \frac{\partial u}{\partial y} \tag{7.7.9}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= -\frac{\partial}{\partial t}\left(a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + a_2 \frac{\partial u}{\partial y}\right) = \left(a_1 \frac{\partial u}{\partial x}\right) \\ &= a_1^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2a_1 a_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + a_2^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\end{aligned} \tag{7.7.10}$$

得

$$\begin{aligned}u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n &- \Delta t \left(a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + a_2 \frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j,m}^n \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2}\left(a_1^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2a_1 a_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + a_2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{j,m}^n + O(\Delta t^3)\end{aligned} \tag{7.7.11}$$

空间导数用中心差分近似, 得

$$u_{j,m}^{n+1}=\left[1-\frac{r_1}{2}\delta_x^0-\frac{r_2}{2}\delta_y^0+\frac{1}{2}(r_1^2\delta_x^2+r_2^2\delta_y^2)+\frac{r_1r_2}{4}\delta_x\delta_y\right]u_{j,m}^n \tag{7.7.12}$$

这里 δ_x^2 和 δ_y^2 分别为 x 和 y 的二阶中心差分算子, δ_x^0 和 δ_y^0 分别为 x 和 y 的一阶中心差分算子, 且

$$\delta_x^0u_{j,m}^n=u_{j+1,m}^n-u_{j-1,m}^n,\qquad \delta_y^0u_{j,m}^n=u_{j,m+1}^n-u_{j,m-1}^n \tag{7.7.13}$$

显然显式格式 (7.7.12) 是一个二阶精度格式, 增长因子为

$$G=1-r_1^2(1-\cos\sigma_1h)-r_2^2(1-\cos\sigma_2h)+r_1r_2\sin\sigma_1h\sin\sigma_2h-i(r_1\sin\sigma_1h+r_2\sin\sigma_2h) \tag{7.7.14}$$

稳定性条件为 $|r_1|\leqslant\frac{1}{2\sqrt{2}}$, $|r_2|\leqslant\frac{1}{2\sqrt{2}}$.

当 $r_2=0$ 时, (7.7.12) 式变为一维 Lax-Wendroff 格式, 即 (7.1.24) 式, 但若由 (7.1.24) 式直接推到二维, 即

$$u_{j,m}^{n+1}=u_{j,m}^n-\left(\frac{r_1}{2}\delta_x^0+\frac{r_2}{2}\delta_y^0\right)u_{j,m}^n+\left(\frac{r_1^2}{2}\delta_x^2+\frac{r_2^2}{2}\delta_y^2\right)u_{j,m}^n \tag{7.7.15}$$

其增长因子为

$$G=1-r_1^2(1-\cos\sigma_1h)-r_2^2(1-\cos\sigma_2h)-i(r_1\sin\sigma_1h+r_2\sin\sigma_2h) \tag{7.7.16}$$

可以证明该格式 (7.7.15) 是不稳定的, 这说明一维差分格式推广到二维或三维并不是直接的.

4. Wendroff 格式

$$\begin{aligned}&\left(1+\frac{1}{2}(1+r_2)\delta_y^+\right)\left(1+\frac{1}{2}(1+r_1)\delta_x^+\right)u_{j,m}^{n+1}\\&=\left(1+\frac{1}{2}(1-r_2)\delta_y^+\right)\left(1+\frac{1}{2}(1-r_1)\delta_x^+\right)u_{j,m}^n\end{aligned} \tag{7.7.17}$$

其中 δ_x^+ 和 δ_y^+ 分别为 x 和 y 的一阶前差分算子, 即 $\delta_x^+u_{j,m}^n=u_{j+1,m}^n-u_{j,m}^n$, $\delta_y^+u_{j,m}^n=u_{j,m+1}^n-u_{j,m}^n$. 该格式的增长因子为

$$G=\frac{(\cos\frac{\sigma_2h}{2}-ir_2\sin\frac{\sigma_2h}{2})(\cos\frac{\sigma_1h}{2}-ir_1\sin\frac{\sigma_1h}{2})}{(\cos\frac{\sigma_2h}{2}+ir_2\sin\frac{\sigma_2h}{2})(\cos\frac{\sigma_1h}{2}+ir_1\sin\frac{\sigma_1h}{2})} \tag{7.7.18}$$

是无条件稳定的, 式中包含 8 个网格点上的值, 如果边值条件已知, 则可以显式计算 $u_{j,m}^{n+1}$ 的值, 即

$$\begin{aligned}u_{j+1,m+1}^{n+1}=&u_{j,m}^n+\frac{1-r_1}{1+r_1}(u_{j+1,m}^n-u_{j,m+1}^{n+1})+\frac{(1-r_1)(1-r_2)}{(1+r_1)(1+r_2)}(u_{j,m+1}^n-u_{j+1,m}^{n+1})\\&+(1-r_1)(u_{j+1,m+1}^n-u_{j,m}^{n+1})\end{aligned} \tag{7.7.19}$$

5. Crank-Nicolson 格式

$$\frac{u_{j,m}^{n+1}-u_{j,m}^{n}}{\Delta t}+\frac{1}{2}\left(a_1\frac{u_{j+1,m}^{n+1}-u_{j-1,m}^{n+1}}{2h}+a_2\frac{u_{j,m+1}^{n+1}-u_{j,m-1}^{n+1}}{2h}\right)$$
$$+\frac{1}{2}\left(a_1\frac{u_{j+1,m}^{n}-u_{j-1,m}^{n}}{2h}+a_2\frac{u_{j,m+1}^{n}-u_{j,m-1}^{n}}{2h}\right)=0 \quad (7.7.20)$$

或

$$\left[1+\frac{r_2}{4}(\delta_x^0+\delta_y^0)\right]\left[1+\frac{r_1}{4}(\delta_x^0+\delta_y^0)\right]u_{j,m}^{n+1}=\left[1-\frac{r_2}{4}(\delta_x^0+\delta_y^0)\right]\left[1-\frac{r_1}{4}(\delta_x^0+\delta_y^0)\right]u_{j,m}^{n} \quad (7.7.21)$$

该格式的截断误差为 $O(\Delta t^2+h^2)$, 增长因子为

$$G=\frac{1-i\dfrac{r_1}{2}\sin\sigma_1 h-i\dfrac{r_2}{2}\sin\sigma_2 h}{1+i\dfrac{r_1}{2}\sin\sigma_1 h+i\dfrac{r_2}{2}\sin\sigma_2 h} \quad (7.7.22)$$

由 $|G|^2=1$ 知格式 (7.7.20) 无条件稳定.

Lax-Wendroff 格式, Wendroff 格式及 Crack-Nicolson 格式的网格点如图 7.8 所示.

§7.8 两步交替方向 ADI 格式

当用隐式格式求解方程 (7.7.1) 时, 要求解的二维抛物型问题的代数方程组有较宽的带宽. 如抛物型问题一样, 可以用交替方向隐式格式.

考虑 CN 格式 (7.7.20) 或 (7.7.21). 若在 (7.7.21) 两边加减适当的项, 则可写成

$$\left(1+\frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\left(1+\frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)u_{j,m}^{n+1}=\left(1-\frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\left(1-\frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)u_{j,m}^{n}$$
$$+\frac{r_1r_2}{16}\delta_x^0\delta_y^0(u_{j,m}^{n+1}-u_{j,m}^{n}) \quad (7.8.1)$$

最后一项是 $O(\Delta t^3)$ 项, 去掉就得一个关于时间和空间均为二阶的一个差分格式

$$\left(1+\frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\left(1+\frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)u_{j,m}^{n+1}=\left(1-\frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\left(1-\frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)u_{j,m}^{n} \quad (7.8.2)$$

该格式称为**Beam-Warming 格式**, 通常写成 ADI 形式

$$\left(1+\frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\bar{u}_{j,m}^{n+1}=\left(1-\frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\left(1-\frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)u_{j,m}^{n} \quad (7.8.3)$$

$$\left(1+\frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)u_{j,m}^{n+1}=\bar{u}_{j,m}^{n+1} \quad (7.8.4)$$

Beam-Warming 格式的增长因子为

$$G=\frac{(1-\mathrm{i}\frac{r_1}{2}\sin\sigma_1 h)(1-\mathrm{i}\frac{r_2}{2}\sin\sigma_2 h)}{(1+\mathrm{i}\frac{r_1}{2}\sin\sigma_1 h)(1+\mathrm{i}\frac{r_2}{2}\sin\sigma_2 h)} \quad (7.8.5)$$

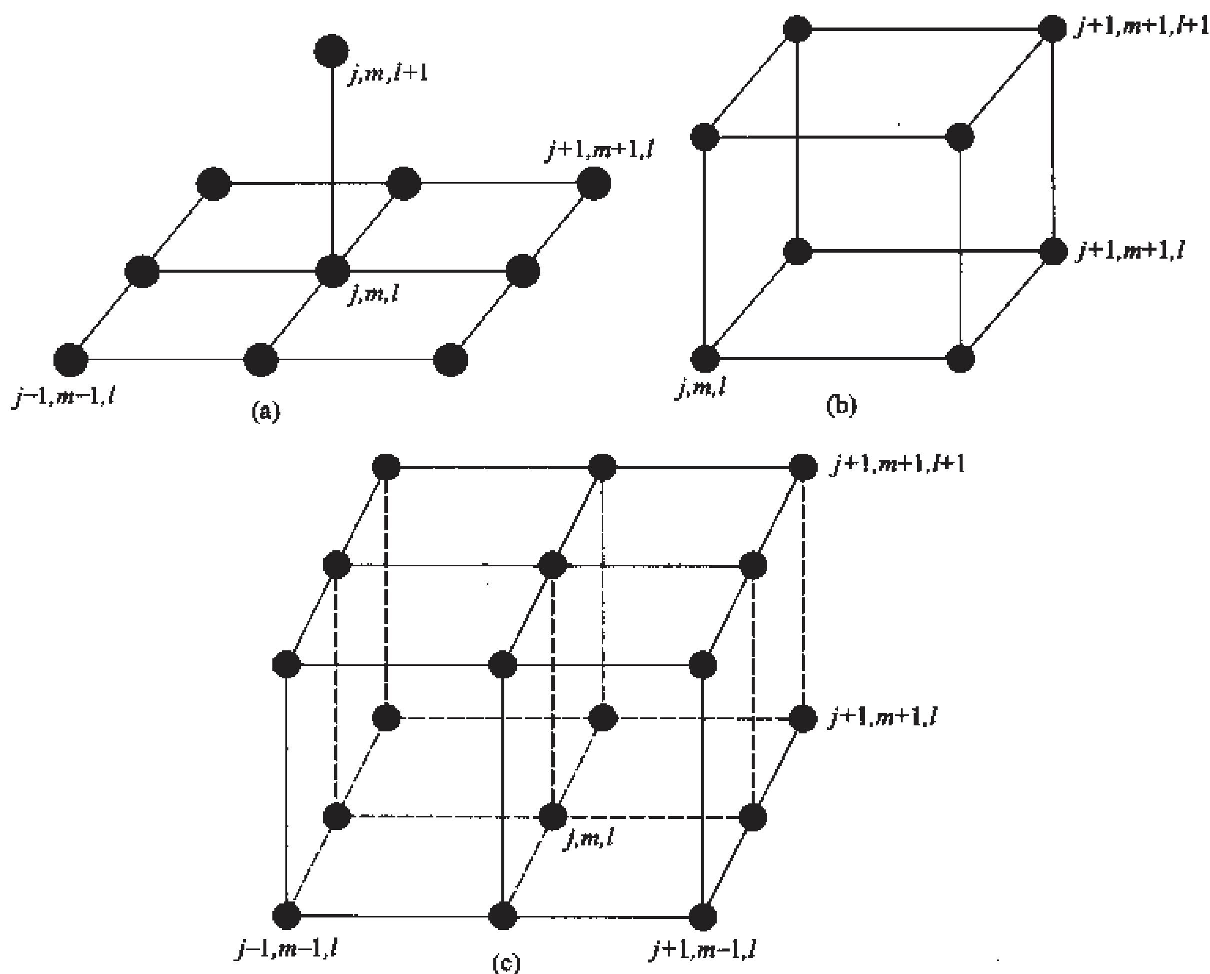


图 7.8 三种格式的网格点

由 $|G|^2 = 1$ 知, 该格式无条件稳定.

若在 (7.8.2) 式两端减去

$$\left(1 + \frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\left(1 + \frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)u_{j,m}^n \tag{7.8.6}$$

则 (7.8.3) 式和 (7.8.4) 式可写成

$$\left(1 + \frac{r_1}{4}\delta_x^0\right)\delta\bar{u}_{j,m}^{n+1} = \left(-\frac{r_1}{2}\delta_x^0 - \frac{r_2}{2}\delta_y^0\right)u_{j,m}^n \tag{7.8.7}$$

$$\left(1 + \frac{r_2}{4}\delta_y^0\right)\delta u_{j,m}^{n+1} = \delta\bar{u}_{j,m}^{n+1} \tag{7.8.8}$$

其中 $\delta u_{j,m}^n = u_{j,m}^{n+1} - u_{j,m}^n$, 该格式称为 **$\delta$ 公式**.

对 Lax-Wendroff 格式, 也可以写成两步的形式. 对一维情形, Lax-Wendroff 格式 (7.1.24) 可写成 $\left(r_1 = ar = a\dfrac{\Delta t}{h}\right)$

$$u_m^{n+1} = (1 - r_1^2)u_m^n - \frac{r_1(1 - r_1)}{2}u_{m+1}^n + \frac{r_1(1 + r_1)}{2}u_{m-1}^n \tag{7.8.9}$$

两步形式为

$$u_m^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_{m+1}^n + u_{m-1}^n) - \frac{r_1}{4}(\delta_x^+ + \delta_x^-)u_m^n \tag{7.8.10}$$

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{r_1}{2}(\delta_x^+ + \delta_x^-)u_m^{n+\frac{1}{2}} \tag{7.8.11}$$

这里引进了中间值 $u_m^{n+\frac{1}{2}}$. (7.8.10) 和 (7.8.11) 式的合成结果为

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{r_1}{4}(u_{m+2}^n - u_{m-2}^n) + \frac{r_1^2}{8}(u_{m+2}^n - 2u_m^n + u_{m-2}^n) \tag{7.8.12}$$

该式相当于步长为 $2h$ 时的 (7.8.9). 若将 (7.8.10)~(7.8.11) 写成下式

$$u_{m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_{m+1}^n + u_m^n) - \frac{r}{2}(u_{m+1}^n - u_m^n) \tag{7.8.13}$$

$$u_m^{n+1} = u_m^n - r(u_{m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) \tag{7.8.14}$$

后再合成即得 (7.8.9)式.

对于二维情形, 类似于 (7.8.10)~(7.8.11) 式, 有

$$\tilde{u}_{j,m}^{n+1} = \bar{u}_{j,m}^n - \frac{r_1}{4}(\delta_x^+ + \delta_x^-)u_{j,m}^n - \frac{r_2}{4}(\delta_y^+ + \delta_y^-)u_{j,m}^n \tag{7.8.15}$$

$$u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n - \frac{r_1}{2}(\delta_x^+ + \delta_x^-)\tilde{u}_{j,m}^{n+1} - \frac{r_2}{4}(\delta_y^+ + \delta_y^-)\tilde{u}_{j,m}^{n+1} \tag{7.8.16}$$

其中

$$\bar{u}_{j,m}^n = \frac{1}{4}(u_{j+1,m}^n + u_{j-1,m}^n + u_{j,m+1}^n + u_{j,m-1}^n) \tag{7.8.17}$$

若 $r_1 = r_2$, 则稳定性条件为 $|r_1| + |r_2| < \frac{1}{\sqrt{8}}$. (7.8.15)~(7.8.17) 式等价于步长为 $2\Delta t$ 的公式. 对单个 Δt 步长, 有

$$u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}} = \bar{u}_{j,m}^n - \frac{r_1}{2}(u_{j+\frac{1}{2},m}^n - u_{j-\frac{1}{2},m}^n) - \frac{r_2}{2}(u_{j,m+\frac{1}{2}}^n - u_{j,m-\frac{1}{2}}^n) \tag{7.8.18}$$

$$u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n - r_1(u_{j+\frac{1}{2},m}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2},m}^{n+\frac{1}{2}}) - r_2(u_{j,m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j,m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) \tag{7.8.19}$$

其中

$$\bar{u}_{j,m}^n = \frac{1}{4}(u_{j+\frac{1}{2},m}^n + u_{j-\frac{1}{2},m}^n + u_{j,m+\frac{1}{2}}^n + u_{j,m-\frac{1}{2}}^n) \tag{7.8.20}$$

若 $r_1 = r_2$, 稳定性条件为 $|r_1| = |r_2| < \frac{1}{\sqrt{2}}$. 公式 (7.8.15)~ (7.8.17) 式或 (7.8.18)~(7.8.20) 式最初由 Richtmyer 提出, 通常称为**Richtmyer 公式**. (7.8.18)~(7.8.20) 式的计算结点如图 7.9(a) 所示, 是菱形. Wilson(1970) 提出了这一公式的两个变形, 第一个称为修正格式, 使用了不同的平均, 结点如图 7.9(b) 所示, 可写为

$$\begin{aligned} u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}} = &\frac{1}{4}(u_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n + u_{j-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n + +u_{j+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n + u_{j-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n) \\ &-\frac{r_1}{2}(u_{j+\frac{1}{2},m}^n - u_{j-\frac{1}{2},m}^n) - \frac{r_2}{2}(u_{j,m+\frac{1}{2}}^n - u_{j,m-\frac{1}{2}}^n) \end{aligned} \tag{7.8.21}$$

$$u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n - r_1(u_{j+\frac{1}{2},m}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2},m}^{n+\frac{1}{2}}) - r_2(u_{j,m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j,m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) \tag{7.8.22}$$

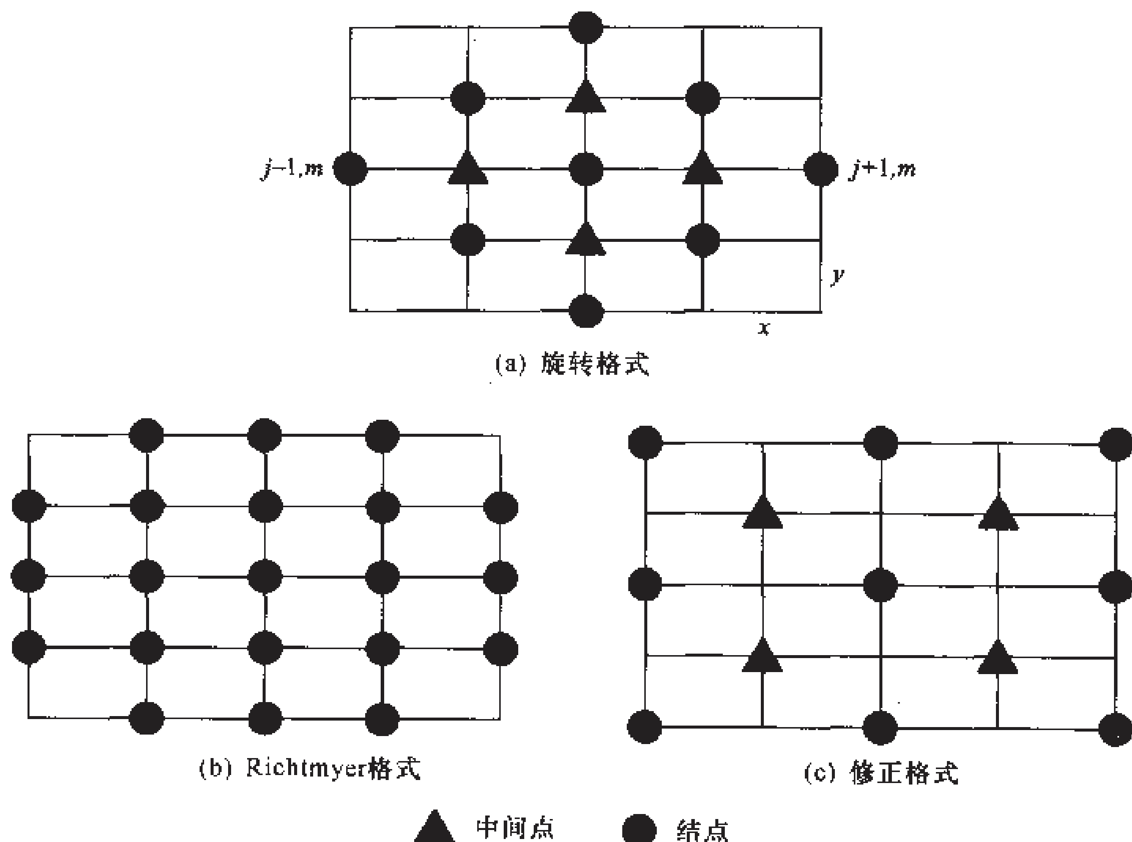


图 7.9 四种不同格式的计算结点

若 $r_1 = r_2$, 则稳定性条件为 $|r_1| = |r_2| < \frac{1}{\sqrt{2}}$.

第二个格式称为**旋转格式**, 是把图 7.9(a) 中的网格点旋转 $\frac{\pi}{4}$ 角度. 可写成

$$\begin{aligned} u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}} = & \frac{1}{4}(u_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n + u_{j-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n + u_{j+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n + u_{j-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n) \\ & -\frac{r_1}{4}(u_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n + u_{j+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n - u_{j-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n - u_{j-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n) \\ & -\frac{r_2}{4}(u_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n + u_{j-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^n - u_{j+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n - u_{j-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^n) \end{aligned} \tag{7.8.23}$$

$$\begin{aligned} u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n & - \frac{r_1}{2}(u_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + u_{j+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) \\ & -\frac{r_2}{2}(u_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + u_{j-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) \end{aligned} \tag{7.8.24}$$

若 $r_1 = r_2$, 则稳定性条件为 $|r_1| = |r_2| < 1$.

Wendroff 格式 (7.7.17) 是一个隐式公式, 可用交替方向来求解, 写成

$$\left[1 + \frac{1}{2}(1 + r_2)\delta_y^+\right] u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}} = \left[1 + \frac{1}{2}(1 - r_1)\delta_x^+\right] u_{j,m}^n \tag{7.8.25}$$

$$\left[1 + \frac{1}{2}(1 + r_1)\delta_x^+\right] u_{j,m}^{n+1} = \left[1 + \frac{1}{2}(1 - r_2)\delta_y^+\right] u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}} \tag{7.8.26}$$

其求解过程为先在半个 Δt 步长处沿 y 方向求解, 再在整个 Δt 步长处沿 x 方向求解. 因为方程的左端只有向前差分算子 δ_x^+ 和 δ_y^+, 也就是说只有两个点值, 且其中一个是已知的初值, 所以 (7.8.25)~(7.8.26) 式实质上可以按显式计算.

§7.9 二维守恒双曲型方程

考虑守恒的双曲型偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial f(u)}{\partial x} + \frac{\partial g(u)}{\partial y} \tag{7.9.1}$$

的差分格式.

1. 两步 Wendroff 格式

可以写成

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{j,m}^{n+1} = & \frac{1}{4}(u_{j-1,m-1}^n + u_{j+1,m-1}^n + u_{j+1,m+1}^n + u_{j-1,m+1}^n) \\ & -\frac{r_1}{4}(f_{j+1,m}^n - f_{j-1,m}^n) - \frac{r_2}{4}(g_{j,m+1}^n - g_{j,m-1}^n) \end{aligned} \tag{7.9.2}$$

$$u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n - \frac{r_1}{2}(\tilde{f}_{j+1,m}^{n+1} - \tilde{f}_{j-1,m}^{n+1}) - \frac{r_2}{2}(\tilde{g}_{j,m+1}^n - \tilde{g}_{j,m-1}^n) \tag{7.9.3}$$

其中 $\tilde{u}_{j,m}^{n+1}$ 是中间值.

另一种格式 (Wilson, 1972) 是

$$\begin{aligned} u_{j+\frac{1}{2},m}^{n+\frac{1}{2}} = & \frac{1}{2}(u_{j,m}^n + u_{j+1,m}^n) - \frac{r_1}{2}(f_{j+1,m}^n - f_{j,m}^n) \\ & -\frac{r_2}{8}(g_{j,m+1}^n + g_{j+1,m+1}^n - g_{j,m-1}^n - g_{j+1,m-1}^n) \end{aligned} \tag{7.9.4}$$

$$\begin{aligned} u_{j,m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = & \frac{1}{2}(u_{j,m}^n + u_{j,m+1}^n) - \frac{r_2}{2}(g_{j,m+1}^n - g_{j,m}^n) \\ & -\frac{r_1}{8}(f_{j+1,m}^n + f_{j+1,m+1}^n - f_{j-1,m}^n - f_{j-1,m+1}^n) \end{aligned} \tag{7.9.5}$$

$$u_{j,m}^{n+1} = u_{j,m}^n - r_1(f_{j+\frac{1}{2},m}^{n+\frac{1}{2}} - f_{j-\frac{1}{2},m}^{n+\frac{1}{2}}) - r_2(g_{j,m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - g_{j,m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) \tag{7.9.6}$$

增长因子为

$$G = 1 - \mathrm{i}(r_1 \sin\sigma_1 h + r_2 \sin\sigma_2 h) - [r_1^2(1-\cos\sigma_1 h) + r_2^2(1-\cos\sigma_2 h) + r_1 r_2 \sin\sigma_1 h \sin\sigma_2 h] \tag{7.9.7}$$

令

$$\mu_x u_{j,m}^n = \frac{1}{2}(u_{j+\frac{1}{2},m}^n + u_{j-\frac{1}{2},m}^n) \tag{7.9.8}$$

$$\delta_x^0 u_{j,m}^n = (u_{j+\frac{1}{2},m}^n - u_{j-\frac{1}{2},m}^n) \tag{7.9.9}$$

$$\delta_x^0 \mu_x u_{j,m}^n = \frac{1}{2}(u_{j+1,m}^n + u_{j-1,m}^n) \tag{7.9.10}$$

则 (7.9.4)~(7.9.6) 式可写成更简单的算子形式

$$\bar{u}^{n+1}_{j+\frac{1}{2},m} = [\mu_x u - \frac{r_1}{2}\delta^0_x f - \frac{r_2}{2}\mu_x\delta^0_y\mu_y g]^n_{j+\frac{1}{2},m} \tag{7.9.11}$$

$$\tilde{u}^{n+1}_{j,m+\frac{1}{2}} = [\mu_y u - \frac{r_1}{2}\delta^0_y\delta^0_x\mu_x f - \frac{r_2}{2}\delta^0_y g]^n_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}} \tag{7.9.12}$$

$$u^{n+1}_{j,m} = u^n_{j,m} - r_1\delta_x\bar{f}^{n+1}_{j,m} - r_2\delta_y\bar{g}^{n+1}_{j,m} \tag{7.9.13}$$

2. 跳点格式

$$\begin{aligned} u^{n+1}_{j,m} &= u^{n-1}_{j,m} - r_1\delta^0_x\delta^0_y f^n_{j,m} - r_2\delta^0_y\mu_y g^n_{j,m} \\ &= u^{n-1}_{j,m} - \frac{r_1}{2}(f^n_{j+1,m} - f^n_{j-1,m}) - \frac{r_2}{2}(g^n_{j,m+1} - g^n_{j,m-1}) \end{aligned} \tag{7.9.14}$$

增长因子为

$$G = -\mathrm{i}(r_1\sin\sigma_1 h + r_2\sin\sigma_2 h) + [1 - (r_1\sin\sigma_1 h + r_2\sin\sigma_2 h)^2]^{\frac{1}{2}} \tag{7.9.15}$$

3. 摇摆跳点格式

$$\begin{aligned} u^{n+1}_{j,m} &= u^n_{j,m} - \frac{1}{2}(r_1\mu_x\delta^0_x f^{n+\frac{1}{2}}_{j,m} + r_2\mu_y\delta^0_y g^{n+\frac{1}{2}}_{j,m}) \\ &= u^n_{j,m} - \frac{r_1}{4}(f^{n+\frac{1}{2}}_{j+1,m} - f^{n+\frac{1}{2}}_{j-1,m}) - \frac{r_2}{4}(g^{n+\frac{1}{2}}_{j,m+1} - g^{n+\frac{1}{2}}_{j,m-1}) \end{aligned} \tag{7.9.16}$$

增长因子为

$$\begin{aligned} G = 1 &- \frac{1}{2}(r_1\sin\sigma_1 h + r_2\sin\sigma_2 h)^2 \\ &+\mathrm{i}(r_1\sin\sigma_1 h + r_2\sin\sigma_2 h)\left[1 - \frac{1}{4}(r_1\sin\sigma_1 h + r_2\sin\sigma_2 h)^2\right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{7.9.17}$$

§7.10 二阶双曲型方程 — 波动方程

前面我们讨论了一阶双曲方程（组）的差分格式, 下面考虑二阶典型双曲型方程的情况, 首先讨论一维情况, 然后考虑二维或三维情况.

§7.10.1 一维波动方程

考虑一维波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{7.10.1}$$

其中 $a > 0$ 为常数, 我们先用解析法来求解. 定义两个新变量

$$\xi = x + at, \quad \eta = x - at \tag{7.10.2}$$

则可将方程 (7.10.1) 简化为

$$\frac{\partial^2 \mu}{\partial\xi\partial\eta} = 0 \tag{7.10.3}$$

对 (7.10.3) 式两次积分解得

$$u(x,t) = f_1(x+at) + f_2(x-at) \tag{7.10.4}$$

其中 f_1 和 f_2 为任意二次可微函数. f_1(或 f_2) 可看作是以 $\pm a$ 向左 (或向右) 移动的波. 直线 $x \pm at = c$(c 为常数) 是方程 (7.10.1) 的两族特征线. 如图 7.10, 设两特征线相交于 C, 与 x 轴的交点分别为 A 和 B, 则交点 C 处的解 u 仅依赖于 $t=0$ 上的区间 AB 上的初值. 三角形 ABC 称为**依赖区域**, 底边 AB 称为**依赖区间**. 若考虑的是经典的 Cauchy 问题, 如无限长弦 $(-\infty \leqslant x \leqslant \infty)$ 的振动, 初始条件为

$$u(x,0) = \varphi(x) \qquad \frac{\partial u}{\partial t}\Big|_{t=0} = \psi(x) \tag{7.10.5}$$

由 (7.10.4) 式得

$$f_1(x) + f_2(x) = \varphi(x) \qquad -af_1'(x) + af_2'(x) = \psi(x) \tag{7.10.6}$$

由此可得

$$u(x,t) = \frac{1}{2}[\varphi(x+at) + \varphi(x-at)] + \frac{1}{2a}\int_{x-at}^{x+at} \psi(\xi)d\xi \tag{7.10.7}$$

此即 **Dalembert 公式**. 该式表明 u 在 $C(x^*,t^*)$ 处的值 $u(x^*,t^*)$ 仅依赖于 x 轴上由 x^*-at^* 到 x^*+at^* 之间的初值 φ 和 ψ. 也即仅由依赖区域内的信息确定, 而 C 点的解 $u(x^*,t^*)$ 的变化将影响到区域 II 中的解, 区域 II 称为点 (x^*,t^*) 的**影响区域**, 物理上, 这由通过求解区域的有限传播速度 (速度为 a) 引起.

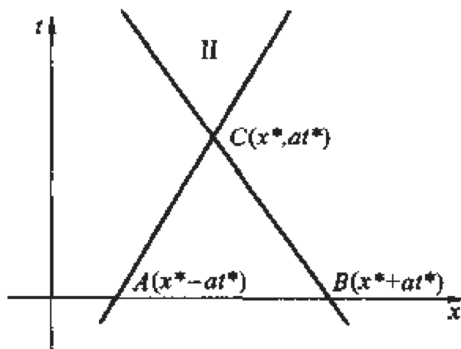


图 7.10 微分方程的依赖区域与影响区域

§7.10.2 显式差分格式

设时间步长为 Δt, 空间步长为 h, 则 (7.10.1) 式的一个明显的格式是

$$\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{\Delta t^2} = a^2 \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} \tag{7.10.8}$$

截断误差阶为 $O(\Delta t^2+h^2)$. 下面考虑初始条件 (7.10.5) 的离散, 一种差分格式为

$$u_m^0=\varphi_m,\quad \frac{u_m^1-u_m^0}{2\Delta t}=\psi_m \tag{7.10.9}$$

其中第二式是一阶精度. 为与方程 (7.10.8) 的二阶精度一致, 引进虚网格点 u_m^{-1}, 采用近似

$$\frac{u_m^1-u_m^{-1}}{2\Delta t}=\psi_m \tag{7.10.10}$$

再令差分方程 (7.10.8) 在 $n=0$ 处成立, 即

$$\frac{u_m^1-2u_m^0+u_m^{-1}}{\Delta t^2}=a^2\frac{u_{m+1}^0-2u_m^0+u_{m-1}^0}{h^2} \tag{7.10.11}$$

由 (7.10.10) 和 (7.10.11) 两式联立消去 u_m^{-1}, 得

$$u_m^1=(1-r^2)u_m^0+\frac{r^2}{2}(u_{m+1}^0+u_{m-1}^0)+\Delta t\psi_m \tag{7.10.12}$$

这是一个 $O(\Delta t^2)$ 阶精度的边界近似方程, 再结合条件 $u_m^0=\varphi_m$ 即可求解. 格式 (7.10.8) 稳定的充要条件是 $r=a\dfrac{\Delta t}{h}<1$.

例 1 用 Von Neumann 方法分析格式 (7.10.8) 的稳定性.

解法一 将 $u_m^n=v^ne^{i\sigma x}=v^ne^{i\sigma mh}$ 代入 (7.10.8) 式, 知增长因子 G 满足

$$G=2(1-r^2)+r^2(e^{i\sigma h}+e^{-i\sigma h})-G^{-1} \tag{7.10.13}$$

即

$$G^2-2\left(1-r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}\right)G+1=0 \tag{7.10.14}$$

由定理 1.5.1 知, 该实系数一元二次方程两根不大于 1 且其中至少有一根按模小于的充要条件是

$$\left|1-2r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}\right|\leqslant 1 \tag{7.10.15}$$

从而 $r\leqslant 1$, 此即格式 (7.10.8) 稳定的充要条件.

解法二 令 $v=\dfrac{\partial u}{\partial t}$, $w=a\dfrac{\partial u}{\partial x}$, 则二维波动方程可写成

$$\begin{aligned}\frac{\partial v}{\partial t}&=a\frac{\partial w}{\partial x}\\ \frac{\partial w}{\partial t}&=a\frac{\partial v}{\partial x}\end{aligned} \tag{7.10.16}$$

建立如下显格式

$$\begin{aligned}\frac{v_m^{n+1}-v_m^n}{\Delta t}&=a\frac{w_{m+\frac12}^n-w_{m-\frac12}^n}{h}\\ \frac{w_{m-\frac12}^{n+1}-v_{m-\frac12}^n}{\Delta t}&=a\frac{v_m^{n+1}-v_{m-1}^{n+1}}{h}\end{aligned} \tag{7.10.17}$$

其中

$$v_m^n = \frac{u_m^n - u_m^{n-1}}{\Delta t}, \quad w_{m-\frac{1}{2}}^n = a\frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} \tag{7.10.18}$$

将 (7.10.18) 式代入 (7.10.17) 式可验证, 显式格式 (7.10.17) 与格式 (7.10.8) 等价. 现采用 Von Neumann 方法来分析格式 (7.10.17) 的稳定性. 令

$$v_m^n = z_1^n e^{i\sigma mh}, \quad w_m^n = z_2^n e^{i\sigma mh}$$

代入 (7.10.17) 式中可得

$$\begin{bmatrix} z_1^{n+1} \\ z_2^{n+1} \end{bmatrix} = G(\sigma, \Delta t)\begin{bmatrix} z_1^n \\ z_2^n \end{bmatrix} \tag{7.10.19}$$

其中增长矩阵 G 为

$$G(\sigma, \Delta t) = \begin{bmatrix} 1 & ic \\ ic & 1-c^2 \end{bmatrix} \tag{7.10.20}$$

这里 $c = 2r\sin\frac{\sigma h}{2}$. G 的特征方程为

$$\lambda^2 - (2-c^2)\lambda + 1 = 0$$

特征方程的两个根为

$$\lambda_{1,2} = 1 - 2r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2} \pm i\sqrt{4r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}(1 - r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}} \tag{7.10.21}$$

两根按模不大于 1 的充要条件是 $r \leqslant 1$. 由于 G 不是正规矩阵, 故条件 $r \leqslant 1$ 是格式 (7.10.8) 稳定的必要条件.

为得到充要条件,我们作如下分析令 $\omega = \sigma h$, 则

$$G = \begin{bmatrix} 1 & i2ar\sin\frac{\omega}{2} \\ i2r\sin\frac{\omega}{2} & 1 - 4r^2\sin^2\frac{\omega}{2} \end{bmatrix}$$

$$\frac{dG}{d\omega} = \begin{bmatrix} 0 & ir\cos\frac{\omega}{2} \\ i\cos\frac{\omega}{2} & -2r^2\sin\omega \end{bmatrix}$$

当 $r < 1$ 时, $\omega = \sigma h \neq 2k\pi$ 时, 由 (7.10.21) 式知 G 有两个不同的特征值, 故格式稳定. 当 $r < 1, \omega = \sigma h = 2k\pi$ 时, 有两个相同的特征根 $\lambda_{1,2} = 1$, 但

$$\frac{dG}{d\omega} = \begin{bmatrix} 0 & i(-1)^k r \\ i(-1)^k r & 0 \end{bmatrix}$$

有两个不同的特征值 $\pm ir$. 根据定理 3.5.6 知, 当 $r < 1$ 时, 格式稳定. 当 $r = 1$ 时, 取 $\omega = \sigma h = k\pi$, 则

$$G = \begin{bmatrix} 1 & 2i \\ 2i & -3 \end{bmatrix}$$

有两个实特征值 $\lambda_{1,2}=-1$, 因此存在非奇异阵 S, 使得

$$G=S\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & -1\end{bmatrix}S^{-1}$$

从而

$$G^k=S\begin{bmatrix}(-1)^k & (-1)^k k\\ 0 & (-1)^k\end{bmatrix}S^{-1},\qquad k=1,2$$

因 G^k 无界, 从而当 $r=1$ 时格式不收敛. 因此格式收敛的充要条件是 $r<1$.

□

§7.10.3 隐式差分格式格式

隐式格式近似有多种, 如:

$$\frac{u_m^{n+1}-2u_m^n+u_m^{n-1}}{\Delta t^2}=\frac{a^2\delta_x^2u_m^{n+1}}{h^2} \tag{7.10.22}$$

或 CN 格式

$$\frac{u_m^{n+1}-2u_m^n+u_m^{n-1}}{\Delta t^2}=a^2\frac{\delta_x^2u_m^{n+1}+\delta_x^2u_m^{n-1}}{2h^2} \tag{7.10.23}$$

或在 $n+1$, n 及 $n-1$ 三个时间层的加权格式

$$\frac{u_m^{n+1}-2u_m^n+u_m^{n-1}}{\Delta t^2}=\frac{a^2}{h^2}[\theta\delta_x^2u_m^{n+1}+(1-2\theta)\delta_x^2u_m^n+\theta\delta_x^2u_m^{n-1}] \tag{7.10.24}$$

其中 $0\leqslant\theta\leqslant 1$. 当 $\theta=0$ 时, 即显式格式 (7.10.8). 当 $\theta=\frac{1}{2}$, 即为 (7.10.23). 格式 (7.10.24) 的截断误差是 $O(\Delta t^2+h^2)$, 截断误差首项是

$$a^2\Delta t^2h^2\left[\frac{1}{12}\left(1-\frac{\Delta t^2}{h^2}\right)+\theta\frac{\Delta t^2}{h^2}\right]\frac{\partial^4u}{\partial x^4} \tag{7.10.25}$$

用 Von Neumann 方法得增长因子 G 满足

$$G-2+\frac{1}{G}=r^2\left[\theta G+(1-2\theta)+\frac{\theta}{G}\right]e^{\mathrm{i}\sigma h}-2+e^{-\mathrm{i}\sigma h} \tag{7.10.26}$$

其中 $r=\frac{a\Delta t}{h}$. 进一步化简, 得

$$G^2-(1-\frac{2r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}}{1+4\theta^2r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}})G+1=0 \tag{7.10.27}$$

稳定性条件为:

(1) 当 $\theta\geqslant\frac{1}{4}$ 时, 无条件稳定.

(2) 当 $0<\theta<\frac{1}{4}$ 时, 稳定性条件为 $0<r<\frac{1}{1-4\theta}$.

§7.10.4 方程组形式的差分格式

1. FC 格式

令 $v = \dfrac{\partial u}{\partial t}$, $w = \dfrac{\partial u}{\partial x}$, 则 (7.10.1) 式可写成一个一阶偏微分方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v}{\partial t} = a\dfrac{\partial w}{\partial x} \\ \dfrac{\partial w}{\partial t} = a\dfrac{\partial v}{\partial t} \end{cases} \tag{7.10.28}$$

对上式在 (m, n) 处, 用时间前差空间中心差分的格式近似 (FC 格式), 得

$$\frac{v_m^{n+1} - v_m^n}{\Delta t} = \frac{a(w_{m+1}^n - w_{m-1}^n)}{2h} \tag{7.10.29}$$

$$\frac{w_m^{n+1} - w_m^n}{\Delta t} = \frac{a(v_{m+1}^n - v_{m-1}^n)}{2h} \tag{7.10.30}$$

用 Von Neumann 方法来分析稳定性. 将 $v_m^n = z_1\xi^n e^{\mathrm{i}\sigma mh}$, $w_m^n = z_2\xi^n e^{\mathrm{i}\sigma mh}$(其中 A, B 为常数) 代入 (7.10.29)~ (7.10.30) 式, 得

$$\begin{bmatrix} z_1^{n+1} \\ z_2^{n+1} \end{bmatrix} = G \begin{bmatrix} z_1^n \\ z_2^n \end{bmatrix} \tag{7.10.31}$$

其中增长矩阵 G 为

$$G = \begin{bmatrix} 1 & \frac{r}{2}(e^{\mathrm{i}\sigma h} - e^{-\mathrm{i}\sigma h}) \\ \frac{r}{2}(e^{\mathrm{i}\sigma h} - e^{-\mathrm{i}\sigma h}) & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \mathrm{i}r\sin\sigma h \\ \mathrm{i}r\sin\sigma h & 1 \end{bmatrix} \tag{7.10.32}$$

这里 $r = \dfrac{a\Delta t}{h}$. G 的特征值为

$$\lambda = 1 \pm \mathrm{i}r\sin\sigma h \tag{7.10.33}$$

因 $|\xi|^2 = 1 + r^2\sin^2\sigma h$. 当 $\sigma h \neq k\pi$ 时, $|\xi|$ 恒大于 1. 故 (7.10.29)~ (7.10.30) 式恒不稳定.

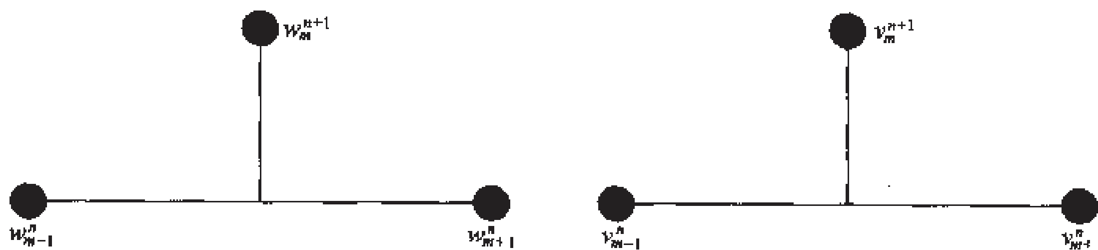


图 7.11 (7.10.29)~(7.10.30) 式的计算结点示意图

若将 (7.10.29)~ (7.10.30) 式中的 v_m^n 用平均值 $\frac{1}{2}(v_{m+1}^n + v_{m-1}^n)$ 代替, w_m^n 也用平均值 $\frac{1}{2}(w_{m+1}^n + w_{m-1}^n)$ 代替, 则不稳定的格式 (7.10.29)~(7.10.30) 变成一个条件

稳定的格式, 为

$$\frac{v_m^{n+1}-\frac{1}{2}(v_{m+1}^n+v_{m-1}^n)}{\Delta t}=\frac{a(w_{m+1}^n-w_{m-1}^n)}{2h} \tag{7.10.34}$$

$$\frac{w_m^{n+1}-\frac{1}{2}(w_{m+1}^n+w_{m-1}^n)}{\Delta t}=\frac{a(v_{m+1}^n-v_{m-1}^n)}{2h} \tag{7.10.35}$$

通过分析可知, 该公式的稳定条件是 $r\leqslant 1$. 该格式的计算网格点如图 7.11 所示.

另一个条件稳定的公式是

$$\frac{v_m^{n+1}-v_m^n}{\Delta t}=\frac{a(w_{m+1}^n-w_{m-1}^n)}{2h} \tag{7.10.36}$$

$$\frac{w_m^{n+1}-w_m^n}{\Delta t}=\frac{a(v_{m+1}^{n+1}-v_{m-1}^{n+1})}{2h} \tag{7.10.37}$$

易知增长矩阵为

$$G=\begin{bmatrix}1 & \mathrm{i}r\sin\sigma h\\ \mathrm{i}r\sin\sigma h & 1-r^2\sin^2\sigma h\end{bmatrix}$$

G 的特征方程为

$$\lambda^2-\lambda(2-r^2\sin^2\sigma h)+1=0$$

由 $|\lambda_{1,2}|\leqslant 1$ 解得 $r\leqslant 2$, 由于 G 是正规矩阵, 因此格式稳定的充要条件是 $r\leqslant 2$.

2. CC格式

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^{n-1}}{2\Delta t}=\frac{a(w_{m+1}^n-w_{m-1}^n)}{2h} \tag{7.10.38}$$

$$\frac{w_m^{n+1}-w_m^{n-1}}{2\Delta t}=\frac{a(v_{m+1}^n-v_{m-1}^n)}{2h} \tag{7.10.39}$$

稳定性条件为 $r=\frac{a\Delta t}{h}\leqslant 1$.

将半步长 $\left(\frac{h}{2}\right)$ 型的 (7.10.34) 式和半步长 $\left(\frac{h}{2}\right)$ 型的 (7.10.30) 式结合起来可得到方程 (7.10.28) 的一个格式

$$\frac{v_{m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}(v_{m+1}^n+v_{m-1}^n)}{\Delta t/2}=\frac{a(w_{m+1}^n-w_{m-1}^n)}{h} \tag{7.10.40}$$

$$\frac{v_m^{n+1}-v_m^n}{\Delta t}=\frac{a(w_{m+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}-w_{m-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})}{h} \tag{7.10.41}$$

两式组合后就是 Lax-Wendroff 格式.

3. CN 隐式格式

$$\frac{v_m^{n+1}-v_m^n}{\Delta t}=\frac{a}{2h}\left[(w_{m+\frac{1}{2}}^n-w_{m-\frac{1}{2}}^n)+(w_{m+\frac{1}{2}}^{n+1}-w_{m-\frac{1}{2}}^{n+1})\right] \tag{7.10.42}$$

$$\frac{w_{m-\frac{1}{2}}^{n+1}-w_{m-\frac{1}{2}}^n}{\Delta t}=\frac{a}{2h}\left[(v_m^n-v_{m-1}^n)+(v_m^{n+1}-v_{m-1}^{n+1})\right] \tag{7.10.43}$$

两式组合后等价于原方程 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}=a^2\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的下列隐式格式

$$\frac{u_m^{n+1}-2u_m^n+u_m^{n-1}}{\Delta t^2}=a^2\frac{\delta_x^2 u_m^{n+1}+2\delta_x^2 u_m^n+\delta_x^2 u_m^{n-1}}{4h^2} \tag{7.10.44}$$

其增长因子为

$$G=\frac{1}{1+\alpha^2/4}\begin{bmatrix}1-\frac{\alpha^2}{4} & \mathrm{i}\alpha\\ \mathrm{i}\alpha & 1-\frac{\alpha^2}{4}\end{bmatrix} \tag{7.10.45}$$

其中 $\alpha=2r/\sin\frac{\sigma h}{2}$. 该矩阵的两个特征值的绝对值都为 1, 又 G 为正规矩阵, 因此, CN 隐式格式 (7.10.42)~(7.10.43) 无条件稳定.

4. 加权 CN 格式

$$\frac{u_m^{n+1}-u_m^n}{\Delta t}=\frac{a}{h}\left[\alpha_1(w_m^{n+1}-w_{m-1}^{n+1})+\beta_1(w_m^{n+1}-w_{m-1}^n)\right] \tag{7.10.46}$$

$$\frac{w_m^{n+1}-w_m^n}{\Delta t}=\frac{a}{h}\left[\alpha_2(v_{m+1}^{n+1}-v_m^{n+1})+\beta_2(v_{m+1}^n-v_m^n)\right] \tag{7.10.47}$$

其中 $\alpha_1,\beta_1,\alpha_2,\beta_2$ 为权因子, 当 $\alpha_1=0,\beta_1=0,\alpha_2=1,\beta_2=0$, 上式成为

$$\frac{v_m^{n+1}-v_m^n}{\Delta t}=\frac{a(w_m^n-w_{m-1}^n)}{h} \tag{7.10.48}$$

$$\frac{w_m^{n+1}-w_m^n}{\Delta t}=\frac{a(v_{m+1}^{n+1}-v_m^{n+1})}{h} \tag{7.10.49}$$

易求得增长矩阵为

$$G=\begin{bmatrix}1 & r(1-r^{-\mathrm{i}\sigma h})\\ -r(1-r^{-\mathrm{i}\sigma h}) & 1-r^2(1-e^{-\mathrm{i}\sigma h})(1-e^{\mathrm{i}\sigma h})\end{bmatrix}$$

G 的特征方程为

$$\lambda^2-2\lambda\left(1-2r^2\sin\frac{\sigma h}{2}\right)+1=0$$

欲使 $|G|\leqslant 1$, 则必须使 $r\leqslant 1$. 由于 G 不是正规矩阵, 故格式 (7.10.48)~(7.10.49) 稳定的充要条件是 $r<1$. 该格式类似抛物形方程中的 Richardson 格式.

5. 交错网格中心差分格式

$$v_m^{n+1}=v_m^n+r(w_{m+\frac12}^n-w_{m-\frac12}^n) \tag{7.10.50}$$

$$w_{m-\frac12}^{n+1}=w_{m-\frac12}^n+r(v_m^{n+1}-v_{m-1}^{n+1}) \tag{7.10.51}$$

两个未知数 v_m^{n+1} 和 $w_{m-\frac12}^{n+1}$ 是在不同的网格点上计算的, 在每一时间层上, 由 (7.10.50) 进行隔点计算, 而漏下的点 (半整数网格点) 由 (7.10.51) 计算, 均为显式. 在上节例 1 中已求得格式稳定的充要条件是 $r<1$. 计算网格点如图 7.12 所示.

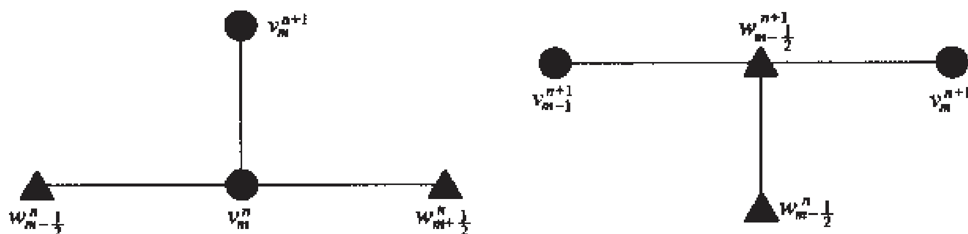


图 7.12 格式 (7.10.50)~(7.10.51) 的计算结点

§7.11 二维声波方程

考虑二维声波方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \tag{7.11.1}$$

如求解区域无界, 仅给出初始条件

$$\begin{aligned} &u(0,x,y) = \varphi_1(x,y) \\ &\tfrac{\partial u}{\partial t}(0,x,y) = \varphi_2(x,y) \end{aligned} \tag{7.11.2}$$

即可求解, 这是初值问题. 实际计算时, 区域总有界, 要给定边界条件, 如,

$$\begin{aligned} u(t,a,y) = \psi_1(t), \quad u(t,b,y) = \psi_2(t) \\ u(t,x,a) = \psi_3(t), \quad u(t,x,b) = \psi_4(t) \end{aligned} \tag{7.11.3}$$

这是一个混合问题, 其中假定 x 和 y 均在区间 $[a,b]$ 上变化. 式 (7.11.1) 的一个显式格式是

$$\frac{u_{j,m}^{n+1} - 2u_{j,m}^n + u_{j,m}^{n-1}}{\Delta t^2} = \frac{u_{j+1,m}^n - 2u_{j,m}^n + u_{j-1,m}^n}{h^2} + \frac{u_{j,m+1}^n - 2u_{j,m}^n + u_{j,m-1}^n}{h^2} \tag{7.11.4}$$

精度为 $O(\Delta t^2 + h^2)$, 截断误差首项是

$$\frac{1}{12}h^2\Delta t^2[(1-r^2)(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4}) - 2r^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2}] \tag{7.11.5}$$

将 $u_{j,m}^n = z^n e^{i\sigma_1 jh} e^{i\sigma_2 mh}$ 代入 (7.11.4) 式中, 并令增长因子 $G = z^{n+1}/z^n$, 则有

$$G^2 - 2[1 - 2r^2(\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2} + \sin^2\frac{\sigma_2 h}{2})]G + 1 = 0 \tag{7.11.6}$$

假定 $\sigma_1 h = \sigma_2 h = \sigma h$, 则其两根为

$$\lambda_{1,2} = 1 - 4r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2} \pm \sqrt{(1 - 4r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2})^2 - 1} \tag{7.11.7}$$

欲使 $|\lambda_{1,2}| \leqslant 1$, 由定理 1.5.2 得稳定性条件为$(r = \frac{\Delta t}{h})$

$$r \leqslant \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{7.11.8}$$

这是必要条件, 与二维情况的 CFL 条件相同. 由该条件知, (7.11.7) 中的根号为负, 即

$$\lambda_{1,2}=1-4r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}\pm \mathrm{i}\sqrt{1-4r^2\sin^2\frac{\sigma h}{2}}$$

由此得 $|\lambda_{1,2}|\equiv 1$. 从而由定理 1.5.1 知, 稳定性的充分必要条件是 $r<\dfrac{1}{\sqrt{2}}$.

格式 (7.11.4) 是一个显格式, 其中 $n=0,1$ 上的数据由初始条件 (7.11.2) 的差分近似得到, 再结合边界条件 (7.11.3), 就可计算 $n=2$ 时间层上的所有 $u(x,y,t)$ 值.

类似于一维问题, 还可以导出方程 (7.11.1) 的隐式格式, 但这些隐式格式通常不实用. 下面考虑 ADI 和 LOD 格式.

首先给出有关 ADI 的格式. 第一个加权隐式格式

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-1}=r^2\delta_x^2[\theta\tilde{u}_{j,m}^{n+1}+(1+2\theta)u_{j,m}^{n}+\theta u_{j,m}^{n-1}]\\+r^2\delta_y^2[(1-2\theta)u_{j,m}^{n}+2\theta u_{j,m}^{n-1}]\end{aligned}\tag{7.11.9}$$

$$u_{j,m}^{n+1}=\tilde{u}_{j,m}^{n+1}+\theta r^2\delta_y^2(u_{j,m}^{n+1}-u_{j,m}^{n-1})\tag{7.11.10}$$

其中 $0\leqslant\theta\leqslant 1$, $\tilde{u}_{j,m}^{n+1}$ 是中间值. 上式可改写成下面的形式

$$\begin{aligned}(1-\theta r^2\delta_x^2)\tilde{u}_{j,m}^{n+1}=2u_{j,m}^{n}-u_{j,m}^{n-1}+r^2\delta_x^2[(1-2\theta)u_{j,m}^{n}+\theta u_{j,m}^{n}]\\+r^2\delta_y^2[(1-2\theta)u_{j,m}^{n}+2\theta u_{j,m}^{n-1})\end{aligned}\tag{7.11.11}$$

$$(1-\theta r^2\delta_y^2)u_{j,m}^{n+1}=\tilde{u}_{j,m}^{n+1}-\theta r^2\delta_y^2u_{j,m}^{n-1}\tag{7.11.12}$$

这两个公式的左端都有三个未知数, 第一个公式对应 x 方向, 第二个公式对应 y 方向, 都是分别求解一个三对角方程组. 两式的组合形式为

$$\begin{aligned}u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-1}=r^2(\delta_x^2+\delta_y^2)[\theta u_{j,m}^{n+1}+(1-2\theta)u_{j,m}^{n}+\theta u_{j,m}^{n-1}]\\-r^4\theta^2\delta_x^2\delta_y^2(u_{j,m}^{n+1}-u_{j,m}^{n-1})\end{aligned}\tag{7.11.13}$$

截断误差是 $O(\Delta t^2+h^2)$. 当 $\theta>\frac{1}{4}$ 时, 格式无条件稳定.

第二个格式是

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{j,m}^{n+1}=2u_{j,m}^{n}-u_{j,m}^{n-1}+r^2\delta_x^2\left[\theta\tilde{u}_{j,m}^{n+1}+(1-2\theta)u_{j,m}^{n}+\theta u_{j,m}^{n-1}\right]\\+r^2\delta_y^2u_{j,m}^{n}\end{aligned}\tag{7.11.14}$$

$$u_{j,m}^{n+1}=\tilde{u}_{j,m}^{n+1}+\theta r^2\delta_y^2(u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-1})\tag{7.11.15}$$

组合后的格式为

$$\begin{aligned}u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-1}=r^2(\delta_x^2+\delta_y^2)[\theta u_{j,m}^{n+1}+(1-2\theta)u_{j,m}^{n}+\theta u_{j,m}^{n-1}]\\-r^4\theta^2\delta_x^2\delta_y^2(u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-1})\end{aligned}\tag{7.11.16}$$

该格式的精度也为 $O(h^2+\Delta t^2)$. 当 $\theta>\frac{1}{4}$ 时, 也无条件稳定.

Fairweather 和 Mitchell 提出, (7.11.13) 和 (7.11.16) 是下列公式的特殊情形

$$\begin{aligned}u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-1}=&-(\delta_x^2+\delta_y^2)(au_{j,m}^{n+1}+bu_{j,m}^{n}+cu_{j,m}^{n-1})\\&-\delta_x^2\delta_y^2(du_{j,m}^{n+1}-eu_{j,m}^{n}+fu_{j,m}^{n-1})\end{aligned}\tag{7.11.17}$$

该式的分裂形式是

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{j,m}^{n+1}=&2u_{j,m}^{n}-u_{j,m}^{n-1}-\delta_x^2(a\tilde{u}_{j,m}^{n}+bu_{j,m}^{n}+cu_{j,m}^{n-1})\\&-\delta_y^2\left[\left(b-\frac{e}{a}\right)u_{j,m}^{n}+\left(c-\frac{f}{a}\right)u_{j,m}^{n+1}\right]\end{aligned}\tag{7.11.18}$$

$$u_{j,m}^{n+1}=\tilde{u}_{j,m}^{n+1}-\delta_y^2\left(a\tilde{u}_{j,m}^{n+1}+\frac{e}{a}u_{j,m}^{n}+\frac{f}{a}u_{j,m}^{n-1}\right)\tag{7.11.19}$$

这里要求 $d=a^2$. 利用 Taylor 级数展开可以确定系数 a,b,c,e,f 的值, 为

$$\begin{aligned}&a=c=\frac{1}{12}(1-r^2),\quad b=-\frac{1}{6}(1+5r^2)\\&d=f=\frac{1}{144}(1-r^2)\quad e=-\frac{1}{72}(1+10r^2+r^4)\end{aligned}\tag{7.11.20}$$

公式 (7.11.17)~(7.11.20) 式或 (7.11.18)~(7.11.20) 式均是 $O(\Delta t^6+h^6)$ 阶, 稳定性条件是 $r\leqslant\sqrt{3}-1$.

下面考虑一系列局部一维格式 (LOD). 将方程 (7.11.1) 改写成

$$\frac{1}{2}\frac{\partial^2u}{\partial t^2}=\frac{\partial^2u}{\partial x^2}\tag{7.11.21}$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial^2u}{\partial t^2}=\frac{\partial^2u}{\partial y^2}\tag{7.11.22}$$

在每一时间步长 Δt 上, 用一维的 CN 公式

$$\frac{u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t^2}=\frac{1}{2h^2}(\delta_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}+\delta_{j,m}^{n-\frac{1}{2}})\tag{7.11.23}$$

进行近似, 得

$$\left(1-\frac{r^2}{4}\delta_y^2\right)(u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}+u_{j,m}^{n-\frac{1}{2}})=2u_{j,m}^{n}\tag{7.11.24}$$

$$\left(1-\frac{r^2}{4}\delta_x^2\right)(u_{j,m}^{n+1}+u_{j,m}^{n})=2u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}\tag{7.11.25}$$

当 (x,y) 的求解区域是方形时, 算子 δ_x^2 和 δ_y^2 可交换,(7.11.24) 和 (7.11.25) 可合成为

$$\left(1-\frac{r^2}{4}\delta_x^2\right)\left(1-\frac{r^2}{4}\delta_y^2\right)(u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^{n}+u_{j,m}^{n-1})=r^2\left[(\delta_x^2+\delta_y^2)-\frac{r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2\right]u_{j,m}^{n}\tag{7.11.26}$$

在用 (7.11.24)~(7.11.25) 式求解时, $u_{j,m}^0$ 和 $u_{j,m}^1$ 可由初始条件得到,$u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}$ 可由边值条件和 (7.11.24) 式得到, 这样, 就可沿时间层递推, 每次只是求解两个三对角方程组.

一般地, 可考虑如下的合成形式

$$(1+a\delta_x^2)(1+a\delta_y^2)(u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^n+u_{j-1,m}^{n-1})=r^2[(\delta_x^2+\delta_y^2)+b\delta_x^2\delta_y^2]u_{j,m}^n \tag{7.11.27}$$

要求 $b=2a+\frac{r^2}{4}$. 该式可以分裂成下面的 LOD 形式

$$(1+a\delta_x^2)(u_{j,m}^{n-1}-2u_{j,m}^{n-\frac{1}{2}}+u_{j,m}^n)=\frac{1}{2}r^2\delta_x^2u_{j,m}^{n-\frac{1}{2}} \tag{7.11.28}$$

$$(1+a\delta_y^2)(u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}-2u_{j,m}^n+u_{j,m}^{n-\frac{1}{2}})=\frac{1}{2}r^2\delta_y^2u_{j,m}^n \tag{7.11.29}$$

$$(1+a\delta_x^2)(u_{j,m}^n-2u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}+u_{j,m}^{n+1})=\frac{1}{2}r^2\delta_x^2u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}} \tag{7.11.30}$$

若 $a=b=-\frac{r^2}{4}$, 即为 (7.11.24)~(7.11.25) 式.

若取 $a=\frac{1}{12}-\theta r^2$, $b=\frac{1}{6}$, 其中 θ 为参数, 则 (7.11.27) 变为

$$\begin{aligned}\left[1+\left(\frac{1}{12}-\theta r^2\right)\delta_x^2\right]\left[1+\left(\frac{1}{12}-\theta r^2\right)\delta_y^2\right](u_{j,m}^{n+1}-2u_{j,m}^n+u_{j,m}^{n-1})\\ =r^2\left[(\delta_x^2+\delta_y^2)+\frac{1}{6}\delta_x^2\delta_y^2\right]u_{j,m}^n\end{aligned} \tag{7.11.31}$$

取 $\theta=\frac{1}{12}$, 得到 Fairweather-Mitchell 格式. 可以证明, 当 $\theta\geqslant\frac{1}{4}$ 时, (7.11.31) 式对所有的 $r>0$ 都稳定, 其局部截断误差为当 $\theta=\frac{1}{12}$ 时为 $O(\Delta t^6+h^6)$ 阶, 当 $\theta\neq\frac{1}{12}$ 时为 $O(\Delta t^4+h^4)$ 阶.

§7.12 弹性波方程

§7.12.1 二维弹性波方程

二维弹性波方程可表示为

$$\begin{cases}\rho\dfrac{\partial^2u}{\partial t^2}-\dfrac{\partial}{\partial x}\left[(\lambda+2\mu)\dfrac{\partial u}{\partial x}+\lambda\dfrac{\partial v}{\partial z}\right]-\dfrac{\partial}{\partial z}\left[\mu\left(\dfrac{\partial u}{\partial z}+\dfrac{\partial v}{\partial x}\right)\right]=0\\ \rho\dfrac{\partial^2v}{\partial t^2}-\dfrac{\partial}{\partial x}\left[\mu\left(\dfrac{\partial u}{\partial x}+\dfrac{\partial v}{\partial x}\right)\right]-\dfrac{\partial}{\partial z}\left[\lambda\dfrac{\partial u}{\partial x}+\left(\lambda+2\mu\dfrac{\partial v}{\partial z}\right)\right]=0\end{cases} \tag{7.12.1}$$

这里 u 为 x 方向的位移, v 为 z 方向的位移, ρ 为密度, λ,μ 为 Lame 参数. 利用应力张量和 Hooke 定律, 将方程组 (7.12.1) 写成

$$\begin{cases}\rho\dfrac{\partial^2u}{\partial t^2}-\left(\dfrac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}+\dfrac{\partial\sigma_{xz}}{\partial z}\right)=0\\ \rho\dfrac{\partial^2v}{\partial t^2}-\left(\dfrac{\partial\sigma_{xz}}{\partial x}+\dfrac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z}\right)=0\end{cases} \tag{7.12.2}$$

其中

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= (\lambda+2\mu)\frac{\partial u}{\partial x}+\lambda\frac{\partial v}{\partial z} \\
\sigma_{xz} &= \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{\partial v}{\partial x}\right) \\
\sigma_{zz} &= \lambda\frac{\partial u}{\partial x}+(\lambda+2\mu)\frac{\partial v}{\partial z}
\end{aligned}
\tag{7.12.3}
$$

用交错网格进行离散, 即关于位移 u 的方程在 (i,j) 点离散, 关于位移 v 的方程在 $(i+\dfrac{1}{2},j+\dfrac{1}{2})$ 处离散. x,z,t 的离散步长分别为 Δx, Δz 和 Δt, 则方程 (7.12.1)~(7.12.2) 式的空间二阶精度的差分格式为

$$
\begin{aligned}
&\rho_{i,j}\frac{u_{i,j}^{n+1}-2u_{i,j}^{n}+u_{i,j}^{n-1}}{\Delta t^2}-\frac{T_{i+\frac{1}{2},j}^{xx}-T_{i-\frac{1}{2},j}^{xx}}{\Delta x}-\frac{T_{i,j+\frac{1}{2}}^{xz}-T_{i,j-\frac{1}{2}}^{xz}}{\Delta z}=0 \\
&\rho_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\frac{v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1}-2v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}+v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n-1}}{\Delta t^2}-\frac{T_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{xz}-T_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx}}{\Delta x} \\
&-\frac{T_{i+\frac{1}{2},j+1}^{zz}-T_{i+\frac{1}{2},j}^{zz}}{\Delta z}=0
\end{aligned}
\tag{7.12.4}
$$

其中 $T^{xx}=\sigma_{xx}$, $T^{xz}=\sigma_{xx}$, $T^{zz}=\sigma_{zz}$. 再对 (7.12.3) 进行离散

$$
T_{i+\frac{1}{2},j}^{xx}=(\lambda+2\mu)_{i+\frac{1}{2},j}\frac{u_{i+1,j}^{n}-u_{i,j}^{n}}{\Delta x}+\lambda_{i+\frac{1}{2},j}\frac{v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}-v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n}}{\Delta z} \tag{7.12.5}
$$

$$
T_{i,j+\frac{1}{2}}^{xz}=\mu_{i,j+\frac{1}{2}}\frac{u_{i+1,j+1}^{n}-u_{i,j}^{n}}{\Delta z}+\mu_{i,j+\frac{1}{2}}\frac{v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}-v_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}}{\Delta x} \tag{7.12.6}
$$

$$
T_{i+\frac{1}{2},j}^{zz}=\lambda_{i+\frac{1}{2},j}\frac{u_{i+1,j}^{n}-u_{i,j}^{n}}{\Delta x}+(\lambda+2\mu)_{i+\frac{1}{2},j}\frac{v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}-v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n}}{\Delta z} \tag{7.12.7}
$$

由 (7.12.4)~(7.12.7) 式即可得 $u_{i,j}$ 和 $v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ 的计算公式, 为

$$
\begin{aligned}
u_{i,j}^{n+1}=2u_{i,j}^{n}-u_{i,j}^{n-1}-&\frac{\Delta t^2}{\rho_{i,j}\Delta x^2}[(\lambda+2\mu)_{i+\frac{1}{2},j}(u_{i+1,j}^{n}-u_{i,j}^{n}) \\
&+\lambda_{i+\frac{1}{2},j}(v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}-v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n}) \\
&-(\lambda+2\mu)_{i-\frac{1}{2},j}(u_{i,j}^{n}-u_{i-1,j}^{n})-\lambda_{i-\frac{1}{2},j}(v_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}-v_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}) \\
&-\frac{\Delta t^2}{\rho_{i,j}\Delta x\Delta z}\left[\mu_{i,j+\frac{1}{2}}(u_{i+1,j}^{n}-u_{i,j}^{n})+\mu_{i,j+\frac{1}{2}}(v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n}-v_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n})\right. \\
&\left.-\mu_{i,j-\frac{1}{2}}(u_{i+1,j-1}^{n}-u_{i,j-1}^{n})-\mu_{i,j-\frac{1}{2}}(v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n}-v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n})\right]
\end{aligned}
\tag{7.12.8}
$$

$$
\begin{aligned}
v^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = & 2v^{n}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - v^{n-1}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t^2}{\rho_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\Delta x^2}\Big[\mu_{i+1,j+\frac{1}{2}}(u^n_{i+2,j} - u^n_{i+1,j}) \\
& + \mu_{i+1,j+\frac{1}{2}}(v^n_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2}} - v^n_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) - \mu_{i,j+\frac{1}{2}}(u^n_{i+1,j} - u^n_{i,j}) \\
& - \mu_{i,j+\frac{1}{2}}(v^n_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - v^n_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}})\Big] \\
& - \frac{\Delta t^2}{\rho_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\Delta x\Delta z}\Big[\lambda_{i+\frac{1}{2},j+1}(u^n_{i+1,j+1} - u^n_{i,j+1}) \\
& + (\lambda+2\mu)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(v^n_{i+\frac{1}{2},j+1} - v^n_{i+\frac{1}{2},j}) \\
& - \lambda_{i+\frac{1}{2},j}(u^n_{i+1,j} - u^n_{i,j}) - (\lambda+2\mu)_{i+\frac{1}{2},j}(v^n_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - v^n_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})\Big]
\end{aligned}
\tag{7.12.9}
$$

格式 (7.12.8) 和 (7.12.9) 是时间二阶空间四阶精度的格式. 下面用 Von Neumann 方法来分析格式的稳定性. 若介质均匀, 设 $\Delta x = \Delta z = h$, 将 $[u,v]^T = [g_1 e^{i\sigma_1 x}, g_2 e^{i\sigma_2 z}]^T e^{i\omega t}$ 代人方程 (7.12.8) ~ (7.12.9) 式中, 得

$$
\begin{aligned}
g_1 \sin^2\frac{\omega\Delta t}{2} = & \frac{\Delta t^2}{h^2}\left[\frac{\lambda+2\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2} + \frac{\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}\right]g_1 \\
& + \frac{\Delta t^2}{h^2}\left[\frac{\lambda+2\mu}{\rho}\sin\frac{\sigma_1 h}{2}\sin\frac{\sigma_2 h}{2}\right]g_2
\end{aligned}
\tag{7.12.10}
$$

$$
\begin{aligned}
g_2 \sin^2\frac{\omega\Delta t}{2} = & \frac{\Delta t^2}{h^2}\left[\frac{\lambda+2\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2} + \frac{\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}\right]g_2 \\
& + \frac{\Delta t^2}{h^2}\left[\frac{\lambda+2\mu}{\rho}\sin\frac{\sigma_1 h}{2}\sin\frac{\sigma_2 h}{2}\right]g_1
\end{aligned}
\tag{7.12.11}
$$

记

$$
b_{11} = \frac{\Delta t^2}{h^2}\left[\frac{\lambda+2\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2} + \frac{\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2}\right] \tag{7.12.12}
$$

$$
b_{12} = \frac{\Delta t^2}{h^2}\left[\frac{\lambda+2\mu}{\rho}\sin\frac{\sigma_1 h}{2}\sin\frac{\sigma_2 h}{2}\right] \tag{7.12.13}
$$

$$
b_{22} = \frac{\Delta t^2}{h^2}\left[\frac{\lambda+2\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_2 h}{2} + \frac{\mu}{\rho}\sin^2\frac{\sigma_1 h}{2}\right] \tag{7.12.14}
$$

则 (7.12.10)~(7.12.11) 式可写成

$$
\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} g_1^n \\ g_2^n \end{bmatrix} = \sin^2\frac{\omega\Delta t}{2}\begin{bmatrix} g_1^{n+1} \\ g_2^{n+1} \end{bmatrix} \tag{7.12.15}
$$

矩阵 $B = (b_{i,j})$ 的特征值为

$$
\frac{C_p\Delta t}{h}\sqrt{A^2(\sigma_1)+A^2(\sigma_2)}, \quad \frac{C_s\Delta t}{h}\sqrt{A^2(\sigma_1)+A^2(\sigma_2)}
$$

其中 $A(\sigma) = \sin\frac{\sigma h}{2}$, $C_p = \frac{\lambda+2\mu}{\rho}$, $C_s = \frac{\mu}{\rho}$. 注意 B 是实对称矩阵, 故在均匀介质情况下, 当 $\Delta x = \Delta z = h$ 时, 原格式 (7.12.10)~(7.12.11) 式稳定的充分必要条件是

$$
\frac{C\Delta t}{h} \leqslant \frac{1}{4}, \quad C = \max(C_p, C_s)
$$

若介质非均匀, $\Delta x \neq \Delta z$, 则可采用能量分析的方法, 可求得稳定性的充分必要条件为

$$C\Delta t\sqrt{\frac{4}{\Delta x^2}+\frac{4}{\Delta z^2}} \leqslant \frac{\sqrt{2}}{2}$$

§7.12.2 伪谱法

伪谱法即是用快速傅立叶变换来计算空间导数, 用差分法计算时间导数的一种弹性波波场模拟的有效方法, 而且还可以推广到其他类型的方程计算. 考虑二维横向各向同性介质中的弹性波方程, 即

$$\begin{aligned}
\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial x}\left[c_{11}\frac{\partial u_x}{\partial x}+c_{13}\frac{\partial u_x}{\partial x}\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[c_{44}\left(\frac{\partial u_z}{\partial x}+\frac{\partial u_x}{\partial z}\right)\right]+\rho f_x \\
\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial z}\left[c_{44}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[c_{13}\frac{\partial u_z}{\partial x}+c_{33}\frac{\partial u_x}{\partial z}\right]+\rho f_x
\end{aligned} \tag{7.12.16}$$

其中 ρ 为密度, u_x, u_z 分别为 x 方向和 z 方向的位移, C_{11}, C_{13}, C_{33}, C_{44} 为弹性常数, f_x, f_z 分别为震源的水平和垂直分量. 对方程 (7.12.16) 中的时间导数用二阶中心差分格式近似, 可得

$$\begin{aligned}
u_x(t+\Delta t) &= 2u_x(t)-u_x(t-\Delta t)+\frac{\Delta t^2}{\rho}\left\{\frac{\partial}{\partial x}[c_{11}\frac{\partial u_x(t)}{\partial x}+c_{13}\frac{\partial u_z(t)}{\partial z}]\right. \\
&\quad \left.+\frac{\partial}{\partial z}[c_{44}(\frac{\partial u_z(t)}{\partial x}+\frac{\partial u_z(t)}{\partial z})]\right\}+f_x \\
u_z(t+\Delta t) &= 2u_z(t)-u_z(t-\Delta t)+\frac{\Delta t^2}{\rho}\left\{\frac{\partial}{\partial x}[c_{44}(\frac{\partial u_z(t)}{\partial x}+\frac{\partial u_x(t)}{\partial z}]\right. \\
&\quad \left.+\frac{\partial}{\partial z}[c_{13}\frac{\partial u_x(t)}{\partial x}+c_{33}\frac{\partial u_z(t)}{\partial z}]\right\}+f_z
\end{aligned} \tag{7.12.17}$$

其中 Δt 为时间步长. 在伪谱法中, u_x,u_z 对 x,z 的导数都是通过快速傅立叶变换来实现. 例如对函数 $f(x)$, 可如下来计算其一阶导数, 因

$$F(\omega) = \int f(x)e^{-\mathrm{i}\omega x}dx$$

其中 $F(\omega)$ 为 $f(x)$ 的傅立叶变换, 所以 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 的傅立叶变换为 $(-\mathrm{i}\omega)F(\omega)$, 从而

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \int(-\mathrm{i}\omega)F(\omega)e^{\mathrm{i}\omega x}d\omega$$

下面用傅立叶级数方法的思想来分析伪谱法的稳定性条件. 对 (7.12.16) 式中的 x 和 z 分别作空间傅立叶变换, 并令 $a_{ij} = c_{ij}/\rho$, 则有

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2} &= -(a_{11}k_x^2+a_{44}k_z^2)U_x-(a_{13}+a_{44})k_xk_zU_z \\
\frac{\partial^2 U_z}{\partial t^2} &= -(a_{44}k_x^2+a_{33}k_z^2)U_x-(a_{13}+a_{44})k_xk_zU_z
\end{aligned} \tag{7.12.18}$$

其中 U_x,U_z 分别为 u_x,u_z 对 x,z 的二维傅立叶变换, k_x,k_x 分别为 x,z 方向的空间波数. 再将 (7.12.18) 式中的时间偏导数用二阶中心差分近似, 得

$$
\begin{aligned}
U^{k+1} &= [2 - \Delta(a_{11}k_x^2 + a_{44}k_z^2)]U_x^k - U_x^{k-1} + \Delta t^2(a_{13} + a_{44})k_x k_z U_z^k \\
U^{k+1} &= [2 - \Delta(a_{44}k_x^2 + a_{33}k_z^2)]U_z^k - U_z^{k-1} + \Delta t^2(a_{13} + a_{44})k_x k_z U_z^k
\end{aligned}
\tag{7.12.19}
$$

令

$$
\begin{aligned}
\theta_1 &= \Delta t^2(a_{11}k_x^2 + a_{44}k_z^2) \\
\theta_2 &= \Delta t^2(a_{13} + a_{44})k_x k_z \\
\theta_3 &= \Delta t^2(a_{44}k_x^2 + a_{33}k_z^2)
\end{aligned}
\tag{7.12.20}
$$

则 (7.12.19) 可写成

$$
\begin{bmatrix} U_x^{k+1} \\ U_x^k \\ U_z^{k+1} \\ U_z^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2-\theta_1 & -1 & \theta_2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_2 & 0 & 2-\theta_3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_x^k \\ U_x^{k-1} \\ U_z^k \\ U_z^{k-1} \end{bmatrix}
\tag{7.12.21}
$$

为使格式计算稳定, 须使增长矩阵

$$
G = \begin{bmatrix} 2-\theta_1 & -1 & \theta_2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_2 & 0 & 2-\theta_3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}
\tag{7.12.22}
$$

的特征值不大于 1. 于是由 $|G - \lambda I| = 0$ 解得

$$
\theta_2^2\lambda^2 = [1 - \lambda(2 - \theta_3 - \lambda)][1 - \lambda(2 - \theta_1 - \lambda)]
\tag{7.12.23}
$$

从而

$$
\lambda(2 - \theta_3 - \lambda) > 1 \quad 且 \quad \lambda(2 - \theta_1 - \lambda) > 1
\tag{7.12.24}
$$

成立, 或

$$
\lambda(2 - \theta_3 - \lambda) < 1 \quad 且 \quad \lambda(2 - \theta_1 - \lambda) < 1
\tag{7.12.25}
$$

成立, 由此分别解得

$$
\theta_3 \leqslant 4 \quad 且 \quad \theta_1 \leqslant 4
\tag{7.12.26}
$$

也即

$$
\Delta t \leqslant \frac{2}{\sqrt{a_{44}k_x^2 + a_{33}k_z^2}} \quad 且 \quad \Delta t \leqslant \frac{2}{\sqrt{a_{11}k_x^2 + a_{44}k_z^2}}
\tag{7.12.27}
$$

根据采样定理, 波数 k_x,k_z 的最大值为 $\frac{\pi}{\Delta x},\frac{\pi}{\Delta z}$, 因此稳定性条件为

$$
\Delta t \max\left(\sqrt{\frac{c_{33}+c_{44}}{\rho}}, \sqrt{\frac{c_{11}+c_{44}}{\rho}}\right) \leqslant \frac{\sqrt{2}}{\pi}\min(\Delta x, \Delta z)
\tag{7.12.28}
$$

§7.12.3 三维弹性波方程

设 $\boldsymbol{x} \in R^3$, 介质由拉梅 (Lame) 系数 $\lambda(\boldsymbol{x})$ 和 $\mu(\boldsymbol{x})$ 及密度 $\rho(\boldsymbol{x})$ 描述. 若 $\alpha(\boldsymbol{x})$, $\beta(\boldsymbol{x})$ 分别是纵波和横波的波数, 则

$$\lambda(\boldsymbol{x}) = \rho(\boldsymbol{x})[\alpha(\boldsymbol{x})^2 - 2\beta^2(\boldsymbol{x})], \quad \mu(\boldsymbol{x}) = \rho(\boldsymbol{x})\beta(\boldsymbol{x})^2 \tag{7.12.29}$$

三维速度应力形式的弹性波方程是关于 3 个速度分量 $u_i(\boldsymbol{x},t)$ 和 6 个独立的应力张量 $\sigma_{ij}(\boldsymbol{x},t)$ 的 9 个方程构成的一阶微分方程组 $(i,j=1,2,3)$

$$\frac{\partial u_i(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} - b(\boldsymbol{x})\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = b(\boldsymbol{x})[f_i(\boldsymbol{x},t) + \frac{\partial m_{ij}^a(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_i}] \tag{7.12.30}$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} - \lambda(\boldsymbol{x})\frac{\partial u_k(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_k}\delta_{ij} - \mu(\boldsymbol{x})[\frac{\partial u_i(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_i}] = \frac{\partial m_{ij}^s(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} \tag{7.12.31}$$

或

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_x}{\partial t} &= b(\boldsymbol{x})[\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z}] + b(\boldsymbol{x})[f_x(\boldsymbol{x},t) + \frac{\partial m_{xx}^a}{\partial x} + \frac{\partial m_{xy}^a}{\partial y} + \frac{\partial m_{xx}^a}{\partial z}] \\
\frac{\partial u_y}{\partial t} &= b(\boldsymbol{x})[\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z}] + b(\boldsymbol{x})[f_x(\boldsymbol{x},t) + \frac{\partial m_{yx}^a}{\partial x} + \frac{\partial m_{yy}^a}{\partial y} + \frac{\partial m_{yy}^a}{\partial z}] \\
\frac{\partial u_z}{\partial t} &= b(\boldsymbol{x})[\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}] + b(\boldsymbol{x})[f_x(\boldsymbol{x},t) + \frac{\partial m_{zx}^a}{\partial x} + \frac{\partial m_{zy}^a}{\partial y} + \frac{\partial m_{zz}^a}{\partial z}]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} &= (\lambda+2\mu)\frac{\partial u_x}{\partial x} + \lambda(\frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}) + \frac{\partial m_{xx}^s}{\partial t} \\
\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} &= (\lambda+2\mu)\frac{\partial u_y}{\partial y} + \lambda(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z}) + \frac{\partial m_{yy}^s}{\partial t} \\
\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t} &= (\lambda+2\mu)\frac{\partial u_z}{\partial z} + \lambda(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y}) + \frac{\partial m_{zz}^s}{\partial t} \\
\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} &= \mu(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y}) + \frac{\partial m_{xy}^s}{\partial t} \\
\frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial t} &= \mu(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}) + \frac{\partial m_{xz}^s}{\partial t} \\
\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial t} &= \mu(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}) + \frac{\partial m_{yz}^s}{\partial t}
\end{aligned}$$

其中 $b(\boldsymbol{x}) = 1/\rho(\boldsymbol{x})$, f_i 是力源, m_{ij}^a 和 m_{ij}^s 是力矩源张量 m_{ij} 的对称和反对称部分, 即

$$m_{ij}^a(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{2}[m_{ij}(\boldsymbol{x},t) - m_{ji}(\boldsymbol{x},t)], \quad m_{ij}^s(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{2}[m_{ij}(\boldsymbol{x},t) + m_{ji}(\boldsymbol{x},t)]$$

力源 $f_i(\boldsymbol{x},t)$ 可用来表示无方向的点源, 描述内爆或外爆的情况, 可写成

$$f_i(\boldsymbol{x},t) = w(t)d_i\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_s)$$

其中 $w(t)$ 是震源子波, d_i 是单位向量的分量, 表示力源被应用的方向, $\boldsymbol{x}_s$ 是点源的位置. 力矩源可用来描述力偶, 力扭矩等, 点力矩可写成

$$m_{ij}(\boldsymbol{x},t) = -w(t)d_{ij}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_s)$$

其中 d_{ij} 是二阶张量, 表示点力矩被应用的方向.

边界条件是法向应力分量在表面 S 上满足

$$\sigma_{ij}(\boldsymbol{x},t)n_j(\boldsymbol{x}) = t_i(\boldsymbol{x},t)$$

其中 $n_j(\boldsymbol{x})$ 是 S 的外法向的分量, $t_i(\boldsymbol{x},t)$ 面应力分量.

选择 3D 空间网格:

$$\begin{aligned}
x_i &= (i-1)\Delta x, \quad i=1,2\cdots,I \\
y_j &= (j-1)\Delta y, \quad j=1,2\cdots,J \\
z_k &= (k-1)\Delta z, \quad k=1,2\cdots,K \\
t_l &= (l-1)\Delta t, \quad l=1,2\cdots,L
\end{aligned}$$

其中 Δx, Δy, Δz, Δt 分别是 x,y,z,t 方向的步长. 对方程离散时, 对不同的量在不同的网格点上取值. 对正应力在网格点上取值

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}(x_i,y_j,z_k,t_l) &\triangleq \sigma_{xx}(i,j,k,l) \\
\sigma_{yy}(x_i,y_j,z_k,t_l) &\triangleq \sigma_{yy}(i,j,k,l) \qquad (7.12.32)\\
\sigma_{zz}(x_i,y_j,z_k,t_l) &\triangleq \sigma_{zz}(i,j,k,l)
\end{aligned}$$

对剪应力在空间半网格点上取值, 即

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy}\left(x_i+\frac{\Delta x}{2},y_j+\frac{\Delta y}{2},z_k,t_l\right) &\triangleq \sigma_{xy}\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l\right) \\
\sigma_{yz}\left(x_i,y_j+\frac{\Delta y}{2},z_k+\frac{\Delta z}{2},t_l\right) &\triangleq \sigma_{yz}\left(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l\right) \\
\sigma_{xz}\left(x_i+\frac{\Delta x}{2},y_j,z_k+\frac{\Delta z}{2},t_l\right) &\triangleq \sigma_{xz}\left(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},l\right)
\end{aligned}$$

对速度分量在空间半网格点和时间半网格点上取值

$$\begin{aligned}
u_x\left(x_i+\frac{\Delta x}{2},y_j,z_k,t_l+\frac{\Delta t}{2}\right) &\triangleq u_x\left(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}\right) \\
u_y\left(x_i,y_j+\frac{\Delta y}{2},z_k,t_l+\frac{\Delta t}{2}\right) &\triangleq u_y\left(i,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}\right) \\
u_z\left(x_i,y_j,z_k+\frac{\Delta z}{2},t_l+\frac{\Delta t}{2}\right) &\triangleq u_z\left(i,j,k+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

对时间一阶导数取二阶精度的中心差分格式, 对空间一阶导数采用四阶精度的差分格式, 如

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{f_{i-2}-8f_{i-1}+8f_{i+1}-f_{i+2}}{12h}+O(h^4)$$

则速度分量 u_x 的差分方程可写成

$$\begin{aligned}
&u_x(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2})\\
=&u_x(i+\frac{1}{2},j,k,l-\frac{1}{2})\\
&+b(i+\frac{1}{2},j,k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(\sigma_{xx}(i+1,j,k,l)-\sigma_{xx}(i,j,k,l))\\
&+c_2(\sigma_{xx}(i+2,j,k,l)-\sigma_{xx}(i-1,j,k,l))]\\
&+b(i+\frac{1}{2},j,k)\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(\sigma_{xy}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)-\sigma_{xy}(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k,l))\\
&+c_2(\sigma_{xy}(i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k,l)-\sigma_{xy}(i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2},k,l))]\\
&+b(i+\frac{1}{2},j,k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(\sigma_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},l)-\sigma_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(\sigma_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{3}{2},l)-\sigma_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{3}{2},l))]\\
&+b(i+\frac{1}{2},j,k)\Delta t f_x(i+\frac{1}{2},j,k,l)\\
&+b(i+\frac{1}{2},j,k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(m^a_{xx}(i+1,j,k,l)-m^a_{xx}(i,j,k,l))\\
&+c_2(m^a_{xx}(i+2,j,k,l)-m^a_{xx}(i-1,j,k,l))]\\
&+b(i+\frac{1}{2},j,k)\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(m^a_{xy}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)-m^a_{xy}(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k,l))\\
&+c_2(m^a_{xy}(i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k,l)-m^a_{xy}(i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2},k,l))]\\
&+b(i+\frac{1}{2},j,k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(m^a_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},l)-m^a_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(m^a_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{3}{2},l)-m^a_{xz}(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{3}{2},l))]
\end{aligned}\tag{7.12.33}$$

u_y 的差分方程为

$$\begin{aligned}
&u_y(i,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})\\
=&u_y(i,j+\frac{1}{2},k,l-\frac{1}{2})\\
&+b(i,j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(\sigma_{yx}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)-\sigma_{yx}(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l))\\
&+c_2(\sigma_{yx}(i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k,l)-\sigma_{yx}(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l))]\\
&+b(i,j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(\sigma_{yy}(i,j+1,k,l)-\sigma_{yy}(i,j,k,l))\\
&+c_2(\sigma_{yy}(i,j+2,k,l)-\sigma_{yy}(i,j-1,k,l))]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+b(i,j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(\sigma_{yz}(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l)-\sigma_{yz}(i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(\sigma_{yz}(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{3}{2},l)-\sigma_{yz}(i,j+\frac{1}{2},j,k-\frac{3}{2},l))]\\
&+b(i,j+\frac{1}{2},k)\Delta t f_y(i,i+\frac{1}{2},k,l)\\
&+b(i,j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(m^a_{yx}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)-m^a_{yx}(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l))\\
&+c_2(m^a_{yx}(i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k,l)-m^a_{yx}(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l))]\\
&+b(i,j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(m^a_{yy}(i,j+1,k,l)-m^a_{yy}(i,j,k,l))\\
&+c_2(m^a_{yy}(i,j+2,k,l)-m^a_{yy}(i,j-1,k,l))]\\
&+b(i,j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(m^a_{yz}(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l)-m^a_{yz}(i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(m^a_{yz}(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{3}{2},l)-m^a_{yz}(i,j+\frac{1}{2},j,k-\frac{3}{2},l))]
\end{aligned}
\tag{7.12.34}
$$

u_z 的差分方程为

$$
\begin{aligned}
&u_z(i,j,k+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})\\
=&u_z(i,j,k+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2})\\
&+b(i,j,k+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(\sigma_{zx}(i+\frac{1}{2},j,k+j+\frac{1}{2},l)-\sigma_{zx}(i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(\sigma_{zx}(i+\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2},l)-\sigma_{zx}(i-\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2},l))]\\
&+b(i,j,k+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(\sigma_{zy}(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l)-\sigma_{zy}(i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(\sigma_{zy}(i,j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2},l)-\sigma_{zy}(i,j-\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2},l))]\\
&+b(i,j,k+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(\sigma_{zz}(i,j,k+1,l)-\sigma_{zz}(i,j,k,l))\\
&+c_2(\sigma_{zz}(i,j,k+2,l)-\sigma_{zz}(i,j,k-1,l))]\\
&+b(i,j,k+\frac{1}{2})\Delta t f_z(i,j,k+\frac{1}{2},l)\\
&+b(i,j,k+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(m^a_{zx}(i+\frac{1}{2},j,k+j+\frac{1}{2},l)-m^a_{zx}(i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(m^a_{zx}(i+\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2},l)-m^a_{zx}(i-\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2},l))]\\
&+b(i,j,k+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(m^a_{zy}(i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l)-m^a_{zy}(i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l))\\
&+c_2(m^a_{zy}(i,j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2},l)-m^a_{zy}(i,j-\frac{3}{2},j,k+\frac{1}{2},l))]\\
&+b(i,j,k+\frac{1}{2})\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(m^a_{zz}(i,j,k+1,l)-m^a_{zz}(i,j,k,l))
\end{aligned}
$$

$$+c_2(m^a_{zz}(i,j,k+2,l)-m^a_{zz}(i,j,k-1,l))]$$
$$+b(i,j,k+\frac{1}{2})\Delta t f_z(i,j,k+\frac{1}{2},l) \tag{7.12.35}$$

正应力 σ_{xx} 的差分方程为

$$\begin{aligned}
&\sigma_{xx}(i,j,k,l+1)\\
=&\sigma_{xx}(i,j,k,l)\\
&+[\lambda(i,j,k)+2\mu(i,j,k)]\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(u_x(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2})-u_x(i-\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_x(i+\frac{3}{2},j,k,l+\frac{1}{2})-u_x(i-\frac{3}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))]\\
&+\lambda(i,j,k)\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(u_y(i,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i,j-\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_y(i,j+\frac{3}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i,j-\frac{3}{2},k,l+\frac{1}{2}))]\\
&+\lambda(i,j,k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(u_z(i,j,k+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})-u_z(i,j,k-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_z(i,j,k+\frac{3}{2},l+\frac{1}{2})-u_z(i,j,k-\frac{3}{2},l+\frac{1}{2}))]\\
&+[m^s_{xx}(i,j,k,l+1)-m^s_{xx}(i,j,k,l)]
\end{aligned} \tag{7.12.36}$$

σ_{yy} 的差分方程为

$$\begin{aligned}
&\sigma_{yy}(i,j,k,l+1)\\
=&\sigma_{yy}(i,j,k,l)\\
&+[\lambda(i,j,k)+2\mu(i,j,k)]\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(u_y(i,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i,j-\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_y(i,j+\frac{3}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i,j-\frac{3}{2},k,l+\frac{1}{2}))]\\
&+\lambda(i,j,k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(u_x(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2})-u_x(i-\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_x(i+\frac{3}{2},j,k,l+\frac{1}{2})-u_x(i-\frac{3}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))]\\
&+\lambda(i,j,k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(u_z(i,j,k+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})-u_z(i,j,k-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_z(i,j,k+\frac{3}{2},l+\frac{1}{2})-u_z(i,j,k-\frac{3}{2},l+\frac{1}{2}))]\\
&+[m^s_{yy}(i,j,k,l+1)-m^s_{yy}(i,j,k,l)]
\end{aligned} \tag{7.12.37}$$

σ_{zz} 的差分方程为

$$\begin{aligned}
&\sigma_{zz}(i,j,k,l+1)\\
=&\sigma_{zz}(i,j,k,l)\\
&+[\lambda(i,j,k)+2\mu(i,j,k)]\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(u_z(i,j,k+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})-u_z(i,j,k-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}))
\end{aligned}$$

$$+c_2(u_z(i,j,k+\frac{3}{2},l+\frac{1}{2})-u_z(i,j,k-\frac{3}{2},l+\frac{1}{2}))]$$
$$+\lambda(i,j,k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(u_x(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2})-u_x(i-\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))$$
$$+c_2(u_x(i+\frac{3}{2},j,k,l+\frac{1}{2})-u_x(i-\frac{3}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))]$$
$$+\lambda(i,j,k)\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(u_y(i,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i,j-\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}))$$
$$+c_2(u_y(i,j+\frac{3}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i,j-\frac{3}{2},k,l+\frac{1}{2}))]$$
$$+[m_{zz}^s(i,j,k,l+1)-m_{zz}^s(i,j,k,l)] \tag{7.12.38}$$

剪应力分量 σ_{xy} 的差分方程为

$$\sigma_{xy}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l+1)$$
$$=\sigma_{xy}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)$$
$$+\mu(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(u_y(i+1,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}))$$
$$+c_2(u_y(i+2,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_y(i-1,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}))]$$
$$+\mu(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(u_y(i+\frac{1}{2},j+1,k,l+\frac{1}{2})-u_y(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))$$
$$+c_2(u_y(i+\frac{1}{2},j+2,k,l+\frac{1}{2})-u_y(i+\frac{1}{2},j-1,k,l+\frac{1}{2}))]$$
$$m_{xy}^s(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l+1)-m_{xy}^s(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l) \tag{7.12.39}$$

σ_{xz} 的差分方程为

$$\sigma_{xz}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l+1)$$
$$=\sigma_{xz}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)$$
$$+\mu(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta x}[c_1(u_z(i+1,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_z(i,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}))$$
$$+c_2(u_z(i+2,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2})-u_z(i-1,j+\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}))]$$
$$+\mu(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(u_x(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1,l+\frac{1}{2})-u_x(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))$$
$$+c_2(u_x(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+2,l+\frac{1}{2})-u_x(i+\frac{1}{2},j,k-1,l+\frac{1}{2}))]$$
$$m_{xz}^s(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l+1)-m_{xz}^s(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l) \tag{7.12.40}$$

σ_{yz} 的差分方程为

$$
\begin{aligned}
&\sigma_{yz}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l+1)\\
=&\sigma_{yz}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)\\
&+\mu(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta y}[c_1(u_z(i+\frac{1}{2},j+1,l+\frac{1}{2})-u_z(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_z(i+\frac{1}{2},j+2,k,l+\frac{1}{2})-u_z(i+\frac{1}{2},j-1,k,l+\frac{1}{2}))]\\
&+\mu(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k)\frac{\Delta t}{\Delta z}[c_1(u_y(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1,l+\frac{1}{2})-u_y(i+\frac{1}{2},j,k,l+\frac{1}{2}))\\
&+c_2(u_y(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+2,l+\frac{1}{2})-u_y(i+\frac{1}{2},j,k-1,l+\frac{1}{2}))]\\
&m_{yz}^s(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l+1)-m_{yz}^s(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k,l)
\end{aligned}
\tag{7.12.41}
$$

由 (7.12.33)~(7.12.41) 式即可显式求解速度向量和应力张量, 最后, 可输出三分量速度记录, 也可由

$$-\frac{1}{3}\sigma_{ii}(\boldsymbol{x},t)=-\frac{1}{3}[\sigma_{11}(\boldsymbol{x},t)+\sigma_{22}(\boldsymbol{x},t)+\sigma_{33}(\boldsymbol{x},t)]$$

输出声压记录.

练 习

1. 对一维波动方程 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$. 令 $p=\frac{\partial u}{\partial x}$, $q=\frac{\partial u}{\partial t}$, 将其化成一阶双曲型方程组

$$\begin{cases}\frac{\partial p}{\partial x}=\frac{\partial q}{\partial t}\\ \frac{\partial q}{\partial x}=\frac{\partial p}{\partial t}\end{cases}$$

构造相应的 Leap-frog 差分格式

(1)

$$\frac{p_{j+1}^n-p_{j-1}^n}{2\Delta x}=\frac{q^{n+1}-\frac{1}{2}(q_{j+1}^n+q_{j-1}^n)}{\Delta t}$$
$$\frac{q_{j+1}^n-q_{j-1}^n}{2\Delta x}=\frac{p^{n+1}-\frac{1}{2}(p_{j+1}^n+p_{j-1}^n)}{\Delta t}$$

(2)

$$\frac{p_{j+\frac{1}{2}}^n-p_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x}=\frac{q_j^{n+1}-q_j^n}{\Delta t}$$
$$\frac{q_j^{n+1}-q_{j-1}^{n+1}}{\Delta x}=\frac{p_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}-p_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta t}$$

证明这两种格式的稳定性条件均为 $\frac{\Delta x}{\Delta t} \leqslant 1$.

2. 写出三维问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + a_2 \frac{\partial u}{\partial y} + a_3 \frac{\partial u}{\partial z} = 0$$

的 Lax-Friedrichs 差分格式, 并分析稳定性.

3. 用迎风格式和 Lax-Wendroff 格式近似无粘 Burger 方程的初边值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{u^2}{2}) = 0 \\ u(x,0) = u_0(x) = \begin{cases} 2, & x \leqslant 0 \\ -1, & x > 0 \end{cases} \\ u(-2,t) = 2, \quad u(2,t) = -1 \end{cases}$$

4. 求差分格式

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \frac{4R}{3}\delta_x^0 u_j^n + \frac{R}{6}(u_{j+2}^n - u_{j-2}^n)$$

近似方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

的精度, 并证明该格式是稳定的. 其中 $R = a\frac{\Delta t}{\Delta x}$, $\delta_x^0 u_j^n = u_{j+1}^n - u_{j-1}^n$.

5. 证明差分格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{R}{2}(1 - \frac{1}{6}\delta_x^2)\delta_x^0 u_j^n + \frac{R^2}{2}\left(\frac{4}{3} + R^2\right)\delta_x^2 u_j^n - \frac{R^2}{8}(\frac{1}{3} + R^2)(\delta_x^0)^2 u_j^n$$

是对方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的 $O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4)$ 阶近似, 并求稳定性条件. 其中 $R = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$, $\delta_x^0 u_j^n = u_{j+1}^n - u_j^n$, $\delta_x^2 u_j^n = u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n$.

6. 确定下列近似方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ 的差分格式的精度和稳定性条件

(1)

$$u^{n+1} = u_j^{n-1} - R\delta_x^0 u_j^n$$

(2)

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - R\delta_x^0 u_j^n + \frac{R^2}{6}\delta_x^2 \delta_x^0 u_j^n$$

(3)

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - R\delta_x^0 u_j^n + \frac{R}{6}\delta_x^2 \delta_x^0 u_j^n - \frac{R}{30}\delta_x^4 \delta_x^0 u_j^n$$

(4)

$$u_j^{n+2} = u^{n-2} - \frac{2R}{3}(1 - \frac{1}{6}\delta_x^2)\delta_x^0(2u_j^{n+1} - u_j^n + 2_j^{n-1})$$

其中 $R = a\frac{\Delta t}{\Delta x}$, $\delta_x^2 = u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n$, $\delta_x^0 u_j^n = u_{j+1}^n - u_{j-1}^n$.

7. 方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}-2\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+1=0$$

满足初始条件

$$u|_{y=0}=\frac{\partial u}{\partial y}|_{y=0}=x,\quad 0\leqslant x\leqslant 1$$

如图 7.13 所示, 给定初始点 $P(0.4,0)$, $Q(0.5,0)$, $W(0.6,0)$, 用特征线方法计算 R 和 S 点处的值.

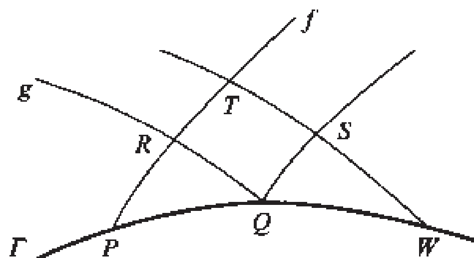


图 7.13 初始线与特征线示意图

8. 方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+(1-2x)\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+(x^2-x-2)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0$$

满足初始条件 $u|_{y=0}=x$, $\frac{\partial u}{\partial y}|_{y=0}=1$, $0\leqslant x\leqslant 1$. 如图上 7.13, 仍取上题中初始点 P,Q,W, 计算 R 点和 S 点处的值.

9. 证明

(1) Lax-Friedrichs 格式 (7.1.8) 的修正偏微分方程为

$$0=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{ah}{2}(1-r^2)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-\frac{ah^2}{3}(1-r^2)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\tag{7.12.42}$$

(2) 蛙跳格式 (7.1.12) 的修正方程为

$$0=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{ah^2}{6}(1-r^2)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\tag{7.12.43}$$

(3) 中心差分格式 (7.1.4) 的修正方程为

$$0=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{ah^2}{6}(1-r^2)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\tag{7.12.44}$$

第八章　流体力学方程

首先介绍流体力学的基本控制方程, 然后介绍一些典型的差分格式. 这些内容可作为进一步深入学习的基础.

§8.1 流体动力学的控制方程

流体动力学的控制方程可通过动量守恒, 牛顿第二定律和能量守恒来导出, 分别得到连续性方程, 动量方程和能量方程. 具体推导可参考文献如[22-23]、[28-29]等.

1. 粘性流方程 (Navier-Stokes 方程)

当流体的输运有摩擦, 热传导和（或）物质扩散现象时, 流动具有粘性, 这种输运是耗散的, 流动的熵总是增加. 描述如下:

(1) 连续方程

非守恒形式

$$\frac{D\rho}{\partial t}+\rho\nabla\cdot\boldsymbol{V}=0 \tag{8.1.1}$$

守恒形式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{V})=0 \tag{8.1.2}$$

(2) 动量方程

非守恒形式

$$\rho\frac{Du}{Dt}=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\tau_{yx}}{\partial y}+\frac{\tau_{zx}}{\partial z}+\rho f_x \tag{8.1.3}$$

$$\rho\frac{Dv}{Dt}=-\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{\tau_{xy}}{\partial x}+\frac{\tau_{yy}}{\partial y}+\frac{\tau_{zy}}{\partial z}+\rho f_y \tag{8.1.4}$$

$$\rho\frac{Dw}{Dt}=-\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{\tau_{xz}}{\partial x}+\frac{\tau_{yz}}{\partial y}+\frac{\tau_{zz}}{\partial z}+\rho f_z \tag{8.1.5}$$

守恒形式

$$\frac{\partial\rho u}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho u\boldsymbol{V})=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\tau_{yx}}{\partial y}+\frac{\tau_{zx}}{\partial z}+\rho f_x \tag{8.1.6}$$

$$\frac{\partial\rho v}{Dt}+\nabla\cdot(\rho v\boldsymbol{V})=-\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{\tau_{xy}}{\partial x}+\frac{\tau_{yy}}{\partial y}+\frac{\tau_{zy}}{\partial z}+\rho f_y \tag{8.1.7}$$

$$\frac{\partial\rho w}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho w\boldsymbol{V})=-\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{\tau_{xz}}{\partial x}+\frac{\tau_{yz}}{\partial y}+\frac{\tau_{zz}}{\partial z}+\rho f_z \tag{8.1.8}$$

(3) 能量方程

非守恒形式

$$\begin{aligned}\rho\frac{D}{Dt}\left(e+\frac{V^2}{2}\right)=\rho\dot{q}&+\frac{\partial}{\partial x}\left(K\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(K\frac{\partial T}{\partial z}\right)\\&-\frac{\partial up}{\partial x}-\frac{\partial vp}{\partial y}-\frac{\partial wp}{\partial z}+\frac{\partial u\tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial u\tau_{yx}}{\partial y}\\&+\frac{\partial u\tau_{zx}}{\partial z}+\frac{\partial v\tau_{xy}}{\partial x}+\frac{\partial v\tau_{yy}}{\partial y}\\&+\frac{\partial v\tau_{zy}}{\partial z}+\frac{\partial w\tau_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial w\tau_{yz}}{\partial y}+\frac{\partial w\tau_{zz}}{\partial z}+\rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{V}\end{aligned} \tag{8.1.9}$$

守恒形式

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(e+\frac{V^2}{2}\right)\right]+\nabla\cdot\left[\rho\left(e+\frac{V^2}{2}\right)\boldsymbol{V}\right]=\rho\dot{q}&+\frac{\partial}{\partial x}(K\frac{\partial T}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(K\frac{\partial T}{\partial y})\\&+\frac{\partial}{\partial x}(K\frac{\partial T}{\partial z})-\frac{\partial up}{\partial x}-\frac{\partial vp}{\partial y}-\frac{\partial wp}{\partial z}+\frac{\partial u\tau_{xx}}{\partial x}\\&+\frac{\partial u\tau_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial u\tau_{zx}}{\partial z}+\frac{\partial v\tau_{xy}}{\partial x}+\frac{\partial v\tau_{yy}}{\partial y}\\&+\frac{\partial v\tau_{zy}}{\partial z}+\frac{\partial w\tau_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial w\tau_{yz}}{\partial y}+\frac{\partial w\tau_{zz}}{\partial z}+\rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{V}\end{aligned} \tag{8.1.10}$$

上式中, 其中 $\dot{q}$ 是每单位质量体积的热增加的速率, μ 是分子粘性系数, λ 是第二粘性系数, 并且假定 $\lambda=-\frac{2}{3}\mu$. e 是每单位质量的由于分子随机运动所致的内能, $\boldsymbol{f}$ 是外力, $\boldsymbol{V}=u\boldsymbol{i}+v\boldsymbol{j}+w\boldsymbol{k}$ 是流场速度, τ_{ij} 是应力, ρ 是密度, p 是压力, $\dot{q}_x,\dot{q}_y,\dot{q}_z$ 分别是 x,y,z 方向的热通量. 根据热传导定律, 由于热传导所引起的热通量正比于局部温度梯度, 即

$$\dot{q}_x=-K\frac{\partial T}{\partial x},\quad \dot{q}_y=-K\frac{\partial T}{\partial y},\quad \dot{q}_z=-K\frac{\partial T}{\partial z} \tag{8.1.11}$$

其中 K 是导热系数, T 是绝对温度, $\frac{D}{Dt}$ 表示

$$\frac{D}{Dt}\equiv\frac{\partial}{\partial t}+u\frac{\partial}{\partial x}+v\frac{\partial}{\partial y}+w\frac{\partial}{\partial z} \tag{8.1.12}$$

2. 无粘性流方程 (Euler 方程)

无粘性, 就是耗散, 粘性和物质扩散和热传导可以忽略, 由上面的方程去掉涉及摩擦及热传导项即可得三维可压无粘性流方程. 描述如下:

(1) 连续方程

非守恒形式

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho\nabla\cdot\boldsymbol{V} = 0 \tag{8.1.13}$$

守恒形式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{V}) = 0 \tag{8.1.14}$$

(2) 动量方程

非守恒形式

$$\rho\frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial\rho}{\partial x} + \rho f_x \tag{8.1.15}$$

$$\rho\frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial\rho}{\partial y} + \rho f_y \tag{8.1.16}$$

$$\rho\frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial\rho}{\partial z} + \rho f_z \tag{8.1.17}$$

守恒形式

$$\frac{\partial\rho u}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho u\boldsymbol{v}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho f_x \tag{8.1.18}$$

$$\frac{\partial\rho v}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho v\boldsymbol{v}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho f_y \tag{8.1.19}$$

$$\frac{\partial\rho w}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho w\boldsymbol{v}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho f_z \tag{8.1.20}$$

(3) 能量方程

非守恒形式

$$\rho\frac{\partial D}{Dt}\left(e + \frac{V^2}{2}\right) = \rho\dot{q} - \frac{\partial up}{\partial x} - \frac{\partial vp}{\partial y} - \frac{\partial wp}{\partial z} + \rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{V} \tag{8.1.21}$$

守恒形式

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(e + \frac{V^2}{2}\right)\right] + \nabla\cdot\left[\rho\left(e + \frac{V^2}{2}\right)\right] = \rho\dot{q} - \frac{\partial up}{\partial x} - \frac{\partial vp}{\partial y} - \frac{\partial wp}{\partial z} + \rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{V} \tag{8.1.22}$$

注意:

1. 对于动量和能量方程, 守恒和非守恒的差别是方程的左边, 方程右边一样, 守恒形式的方程在左边含有某一个量的散度形式, 由于这个原因, 守恒形式的控制方程有时也称为散度形式的控制方程.

2. 方程中的应力是速度梯度的函数.Newton 流体假定流体中的应力正比于应变的时间变化律, 即速度梯度, 实际上, 所有的实际空气动力学问题, 都可以假定流体是 Newton 流体, 这时有如下关系式 (Stokes,1845)

$$\tau_{xx} = \lambda(\nabla \cdot \boldsymbol{V}) + 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} \tag{8.1.23}$$

$$\tau_{yy} = \lambda(\nabla \cdot \boldsymbol{V}) + 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} \tag{8.1.24}$$

$$\tau_{zz} = \lambda(\nabla \cdot \boldsymbol{V}) + 2\mu\frac{\partial w}{\partial z} \tag{8.1.25}$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) \tag{8.1.26}$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \tag{8.1.27}$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) \tag{8.1.28}$$

3. 上面 N.S. 方程或 Euler 方程中, 有五个方程 (一个连续方程, 三个动量方程和一个能量方程), 6 个未知变量: ρ, p, u, v, w, e. 在空气动力学中, 假定是理想气体 (分子内力忽略), 对理想气体, 状态方程是

$$p = \rho RT \tag{8.1.29}$$

其中 $R = 8.31\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{Mol}^{-1}$ 是气体常数, T 是温度, 再根据内能公式

$$e = e(p, T) \tag{8.1.30}$$

对理想气体, 有

$$e = c_v T \tag{8.1.31}$$

其中 c_v 是定体比热容.

4. 守恒形式的可以将控制方程写成简单的矩阵形式

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} + \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial y} + \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial z} = \boldsymbol{J} \tag{8.1.32}$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 为解向量, $\boldsymbol{J}$ 为源项, $\boldsymbol{F}, \boldsymbol{G}, \boldsymbol{H}$ 为通量函数. 读者自己写出具体表达式. 对于定常流, 方程 (8.1.32) 可写成

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} = \boldsymbol{J} - \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial y} - \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial z} \tag{8.1.33}$$

其中 $\boldsymbol{F}$ 成为解向量.

流体力学的方程组的类型经常是不定的. 如二维定常不可压 Euler 方程组

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0 \\ u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x}=0 \\ u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y}=0 \end{cases} \tag{8.1.34}$$

是一个一阶拟线性偏微分方程组, 它的特征行列式的特征根是 $\frac{v}{u}$ 和 $\pm$ i, 即有实根和虚根, 方程既不是双曲型的也不是椭圆型的, 类型不定.

§8.2 二维非定常可压粘性流方程

假定没有体力及绝热, 则二维非守恒形式的非定常可压粘性流方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}=-\left(\rho\frac{\partial u}{\partial x}+u\frac{\partial \rho}{\partial x}+\rho\frac{\partial v}{\partial y}+v\frac{\partial \rho}{\partial y}\right) \tag{8.2.1}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}=-\left(u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x}\right) \tag{8.2.2}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}=-\left(u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y}\right) \tag{8.2.3}$$

$$\frac{\partial e}{\partial t}=-\left(u\frac{\partial e}{\partial x}+v\frac{\partial e}{\partial y}+\frac{p}{\rho}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{p}{\rho}\frac{\partial v}{\partial y}\right) \tag{8.2.4}$$

在低速时, 该方程组对时间是抛物型方程, 在任一时刻则为椭圆型方程; 在高速时, 对时间接近双曲型方程. 在给定初边值条件, 问题是适定的混合问题.

§8.2.1 Lax-Wendroff 格式

Lax-Wendroff 方法通过对时间作 Taylor 展开来求得下一时间层上变量的值. 用 (i,j,k) 表示 (x,y,t) 处的网格点. 对 ρ,u,v,e 关于时间的 Taylor 展开为 (取前三项)

$$\rho_{i,j}^{k+1}=\rho_{i,j}^{k}+\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^{k}\Delta t+\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}\right)_{ij}^{k}\frac{(\Delta t)^2}{2} \tag{8.2.5}$$

$$u_{i,j}^{k+1}=u_{i,j}^{k}+\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j}^{k}\Delta t+\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_{ij}^{k}\frac{(\Delta t)^2}{2} \tag{8.2.6}$$

$$v_{i,j}^{k+1}=v_{i,j}^{k}+\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{i,j}^{k}\Delta t+\left(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}\right)_{ij}^{k}\frac{(\Delta t)^2}{2} \tag{8.2.7}$$

$$e_{i,j}^{k+1}=e_{i,j}^{k}+\left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{i,j}^{k}\Delta t+\left(\frac{\partial^2 e}{\partial t^2}\right)_{ij}^{k}\frac{(\Delta t)^2}{2} \tag{8.2.8}$$

在方程 (8.2.5)~(8.2.8) 中, 出现 ρ, u, v, e 的时间一阶导数, 这些一阶导数分别由原方程 (8.2.1)~(8.2.4) 对空间采用中心差分离散得到, 即

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\left(\rho_{i,j}^{k}\frac{u_{i+1,j}^{k}-u_{i-1,j}^{k}}{2\Delta x}+u_{i,j}^{k}\frac{\rho_{i+1,j}^{k}-\rho_{i-1,j}^{k}}{2\Delta x}\right.$$
$$\left.+\rho_{i,j}^{k}\frac{v_{i,j+1}^{k}-v_{i,j-1}^{k}}{2\Delta y}+v_{i,j}^{k}\frac{\rho_{i,j+1}^{k}-\rho_{i,j-1}^{k}}{2\Delta y}\right) \tag{8.2.9}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\left(u_{i,j}^{k}\frac{u_{i+1,j}^{k}-u_{i-1,j}^{k}}{2\Delta x}+v_{i,j}^{k}\frac{u_{i,j+1}^{k}-u_{i,j-1}^{k}}{2\Delta y}+\frac{1}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{p_{i+1,j}^{k}-p_{i-1,j}^{k}}{2\Delta x}\right) \tag{8.2.10}$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\left(u_{i,j}^{k}\frac{v_{i+1,j}^{k}-v_{i-1,j}^{k}}{2\Delta x}+v_{i,j}^{k}\frac{v_{i,j+1}^{k}-v_{i,j-1}^{k}}{2\Delta y}+\frac{1}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{p_{i,j+1}^{k}-p_{i,j-1}^{k}}{2\Delta y}\right) \tag{8.2.11}$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\left(u_{i,j}^{k}\frac{e_{i+1,j}^{k}-e_{i-1,j}^{k}}{2\Delta x}+v_{i,j}^{k}\frac{e_{i,j+1}^{k}-e_{i,j-1}^{k}}{2\Delta y}\right.$$
$$\left.+\frac{p_{i,j}^{k}}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{u_{i+1,j}^{k}-u_{i-1,j}^{k}}{2\Delta x}+\frac{p_{i,j}^{k}}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{v_{i,j+1}^{k}-v_{i,j-1}^{k}}{2\Delta y}\right) \tag{8.2.12}$$

在方程 (8.2.5)~(8.2.8) 中的二阶导数项, 也由方程 (8.2.1)~ (8.2.4) 分别对 t 微分得到, 例如 ρ 关于 t 的二阶导数, 为

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = -\rho\frac{\partial^2}{\partial x\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial \rho}{\partial t}+u\frac{\partial^2 \rho}{\partial x\partial t}+\frac{\partial \rho}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial t}+\rho\frac{\partial^2 v}{\partial y\partial t}+\frac{\partial v}{\partial y}\frac{\partial \rho}{\partial t}+v\frac{\partial^2 \rho}{\partial y\partial t}+\frac{\partial \rho}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial t} \tag{8.2.13}$$

在方程 (8.2.13) 中混合导数如 $\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}$ 可由 (8.2.1)~(8.2.4) 式对空间求导数得到, 例如

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t} = -u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+v\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}-\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial p}{\partial x}\frac{\partial \rho}{\partial x} \tag{8.2.14}$$

然后对 (8.2.13) 和 (8.2.14) 分别用中心差分公式近似即可得到 $\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}\right)_{i,j}^{k}$ 之值. 同理对 (8.2.6)~(8.2.8) 中的二阶导数也可类似计算, 略. 最后, 将 (8.2.9)~(8.2.12)式及 $\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}\right)_{i,j}^{k}$, $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_{i,j}^{k}$, $\left(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}\right)_{i,j}^{k}$, $\left(\frac{\partial^2 e}{\partial t^2}\right)_{i,j}^{k}$ 的差分近似式代入 (8.2.5)~(8.2.8)式即可得 Lax-Wendroff 格式.

§8.2.2 MacCormack 格式

仍假定流场在 t 时刻即 k 时间层上已知, 则 (8.2.1)~(8.2.4) 的 MacCormack 格式为

$$\rho_{i,j}^{k+1} = e_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av} \Delta t \tag{8.2.15}$$

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{av} \Delta t \tag{8.2.16}$$

$$v_{i,j}^{k+1} = v_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{av} \Delta t \tag{8.2.17}$$

$$e_{i,j}^{k+1} = e_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{av} \Delta t \tag{8.2.18}$$

其中 $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av}$, $\left(\frac{\partial u}{\partial t}r\right)_{av}$, $\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{av}$ 和 $\left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{av}$ 分别表示相应的量在 k 和 $k+1$ 时间层上的平均. 分预测和校正两步来求这些平均值.

预测步根据原方程 (8.2.1)~(8.2.4) 对空间导数采用向前差分公式, 即

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\Bigg(&\rho_{i,j}^{k}\frac{u_{i+1,j}^{k}-u_{i,j}^{k}}{\Delta x} + u_{i,j}^{k}\frac{\rho_{i+1,j}^{k}-\rho_{i,j}^{k}}{\Delta x} \\ &+\rho_{i,j}^{k}\frac{v_{i,j+1}^{k}-v_{i,j}^{k}}{\Delta y} + v_{i,j}^{k}\frac{\rho_{i,j+1}^{k}-\rho_{i,j}^{k}}{\Delta y}\Bigg)\end{aligned} \tag{8.2.19}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\left(u_{i,j}^{k}\frac{u_{i+1,j}^{k}-u_{i,j}^{k}}{\Delta x} + v_{i,j}^{k}\frac{u_{i,j+1}^{k}-u_{i,j}^{k}}{\Delta y} + \frac{1}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{p_{i+1,j}^{k}-p_{i,j}^{k}}{\Delta x}\right) \tag{8.2.20}$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\left(u_{i,j}^{k}\frac{v_{i+1,j}^{k}-v_{i,j}^{k}}{\Delta x} + v_{i,j}^{k}\frac{v_{i,j+1}^{k}-v_{i,j}^{k}}{\Delta y} + \frac{1}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{p_{i,j+1}^{k}-p_{i,j}^{k}}{\Delta y}\right) \tag{8.2.21}$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} = -\Bigg(&u_{i,j}^{k}\frac{e_{i+1,j}^{k}-e_{i,j}^{k}}{\Delta x} + v_{i,j}^{k}\frac{e_{i,j+1}^{k}-e_{i,j}^{k}}{\Delta y} \\ &+\frac{p_{i,j}^{k}}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{u_{i+1,j}^{k}-u_{i,j}^{k}}{\Delta x} + \frac{p_{i,j}^{k}}{\rho_{i,j}^{k}}\frac{v_{i,j+1}^{k}-v_{i,j}^{k}}{\Delta y}\Bigg)\end{aligned} \tag{8.2.22}$$

然后由下式算得预测值

$$\bar{\rho}_{i,j}^{k+1} = \rho_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} \Delta t \tag{8.2.23}$$

$$\bar{v}_{i,j}^{k+1} = v_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} \Delta t \tag{8.2.24}$$

$$\bar{e}_{i,j}^{k+1} = e_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} \Delta t \tag{8.2.25}$$

校正步由预测值重新计算下一阶导数量, 即将 $\bar{\rho}_{i,j}^{k+1}$, $\bar{u}_{i,j}^{k+1}$, $\bar{v}_{i,j}^{k+1}$ 和 $\bar{e}_{i,j}^{k+1}$ 分别代替 (8.2.19)~ (8.2.22) 式中的 $\rho_{i,j}^k$,$u_{i,j}^k$,$v_{i,j}^k$ 和 $e_{i,j}^k$, 由此算得

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t}\right)_{i,j}^{k+1}\right] \tag{8.2.26}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{av} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t}\right)_{i,j}^{k+1}\right] \tag{8.2.27}$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{av} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial t}\right)_{i,j}^{k+1}\right] \tag{8.2.28}$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{av} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial e}{\partial t}\right)_{i,j}^{k} + \left(\frac{\partial \bar{e}}{\partial t}\right)_{i,j}^{k+1}\right] \tag{8.2.29}$$

再分别代人 (8.2.15)~(8.2.18)式中算出 $k+1$ 时间层上的流场.

Lax-Wendroff 格式和 MacCormack 方法都是二阶精度的显格式, 但后者不用求二阶导数, 更简单. 这两种格式都不适合用来求解椭圆型问题, 不过, 非定常 Navier-Stokes 方程是抛物型和椭圆型的混合, 都可用这两种格式来求解.

§8.3 二维非定常不可压粘性流

由不可压 Navier-Stokes 方程描述的不可压粘性流表现出椭圆型和抛物型的混合特性. 压力校正方法 SIMPLE(Semi-Implicit Method for Pressure-linked Equations) 由 Patankar 和 Spalding(1972) 提出, 实质是一种在交错网格上计算压力的预测校正方法. 令密度 ρ 为常数, 则守恒形式为

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \tag{8.3.1}$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} \tag{8.3.2}$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho uv}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) = -\frac{\partial p}{\partial y} \tag{8.3.3}$$

压力校正法是一个迭代的方法, 迭代过程如下:

1. 给定压力场的初始猜测 p^*, 根据动量方程, 由 p^* 求得速度分量 u^*, v^*.

2. 由连续方程, 建立初始猜测压力场的校正量 p', 求出 p' 加到初始猜测 p^* 上, 即

$$p = p^* + p' \tag{8.3.4}$$

相应地由 p' 算出速度场 u^* 和 v^*, 校正 u' 和 v', 并计算

$$u = u^* + u', \quad v = v^* + v' \tag{8.3.5}$$

3. 将 ρ, u, v 作为新的猜测, 重复前面的步骤, 直至速度场满足连续方程.

下面建立相应的差分格式. 对连续方程 (8.3.1) 是在交错网格上建立差分格式. 如图 8.1, 压力是在实心点网格上建立差分格式, 速度是在空间点网格上建立差分格式, 即压力和速度在不同的网格点上计算. 在 (i,j) 点对方程 (8.3.1) 建立相应的中心差分格式

$$\frac{(\rho u)_{i+\frac{1}{2},j}-(\rho u)_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x}+\frac{(\rho v)_{i,j+\frac{1}{2}}-(\rho u)_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y}=0 \tag{8.3.6}$$

在 $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$ 处对方程 (8.3.2) 建立时间向前, 空间中心的差分格式

$$(\rho u)^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}=(\rho u)^{n}_{i+\frac{1}{2},j}+A\Delta t-\frac{\Delta t}{\Delta x}(p^n_{i+1,j}-p^n_{i,j}) \tag{8.3.7}$$

其中

$$A=-[\frac{(\rho u^2)^n_{i+\frac{3}{2},j}-(\rho u^2)^n_{i-\frac{1}{2},j}}{2\Delta x}+\frac{(\rho uv)^n_{i+\frac{1}{2},j+1}-(\rho uv)^n_{i+\frac{1}{2},j-1}}{2\Delta y}] \tag{8.3.8}$$

$$+\frac{\mu_{i+1,j}(u^n_{i+\frac{3}{2},j}-u^n_{i+\frac{1}{2},j})-\mu_{i,j}(u^n_{i+\frac{1}{2},j}-u^n_{i-\frac{1}{2},j})}{\Delta x^2}$$
$$+\frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(u^n_{i+\frac{1}{2},j+1}-u^n_{i+\frac{1}{2},j})-\mu_{i+\frac{1}{2},j}(u^n_{i+\frac{1}{2},j}-u^n_{i+\frac{1}{2},j-1})}{\Delta y^2} \tag{8.3.9}$$

类似地, 对方程 (8.3.3) 在 $\left(i,j+\frac{1}{2}\right)$ 处建立时间向前空间的差分格式

$$(\rho v)^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}=(\rho v)^{n}_{i,j+\frac{1}{2}}+B\Delta t-\frac{\Delta t}{\Delta y}(p^n_{i,j+1}-p^n_{i,j}) \tag{8.3.10}$$

其中

$$B=-\left[\frac{(\rho vu)^n_{i+1,j+\frac{1}{2}}-(\rho vu)^n_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{2\Delta x}+\frac{(\rho v^2)^n_{i,j+\frac{3}{2}}-(\rho v^2)^n_{i,j-\frac{1}{2}}}{2\Delta y}\right]+$$
$$\frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(v^n_{i+1,j+\frac{1}{2}}-v^n_{i,j+\frac{1}{2}})-\mu_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(v^n_{i,j+\frac{1}{2}}-v^n_{i-1,j+\frac{1}{2}})}{\Delta x^2}+ \tag{8.3.11}$$
$$\frac{\mu_{i,j+1}(v^n_{i,j+\frac{3}{2}}-v^n_{i,j+\frac{1}{2}})-\mu_{i,j}(v^n_{i,j+\frac{1}{2}}-v^n_{i,j-\frac{1}{2}})}{\Delta y^2}$$

在迭代开始时, 令 $p=p^*$, 代入方程 (8.3.7) 和 (8.3.10) 分别计算 $(u^*)^{n+1}$ 和 $(v^*)^{n+1}$, 即

$$(\rho u^*)^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}=(\rho u^*)^{n}_{i+\frac{1}{2},j}+A^*\Delta t-\frac{\Delta t}{\Delta x}[(p^*)^n_{i+1,j}-(p^*)^n_{i,j}] \tag{8.3.12}$$

$$(\rho v^*)^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}=(\rho v^*)^{n}_{i,j+\frac{1}{2}}+B^*\Delta t-\frac{\Delta t}{\Delta y}[(p^*)^n_{i,j+1}-(p^*)^n_{i,j}] \tag{8.3.13}$$

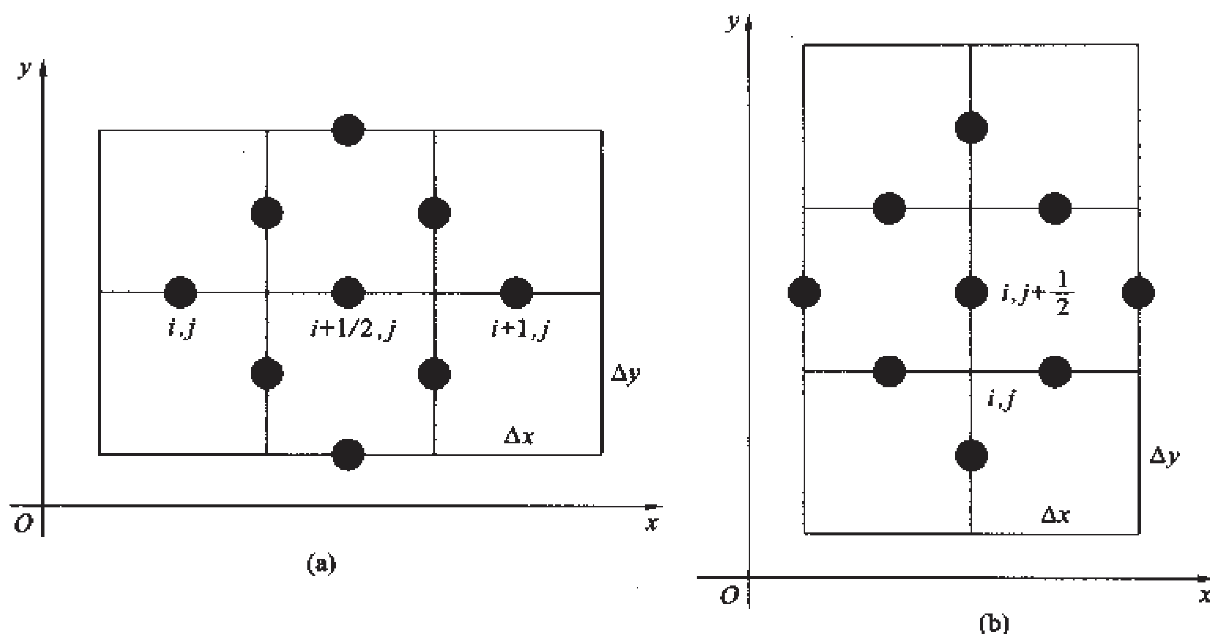


图 8.1 差分格式的网格两点

定义 $p^{'}=p-p^{*}$(其他量类似), 由 (8.3.7) 减去 (8.3.12), 得

$$(\rho u^{'})^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}=(\rho u^{'})^{n}_{i+\frac{1}{2},j}+A^{'}\Delta t-\frac{\Delta t}{\Delta x}[(p^{'})^{n}_{i+1,j}-(p^{'})^{n}_{i,j}] \tag{8.3.14}$$

同理, 由 (8.3.10) 减去 (8.3.13), 得

$$(\rho v^{\prime})^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}=(\rho v^{\prime})^{n}_{i,j+\frac{1}{2}}+B^{'}\Delta t-\frac{\Delta t}{\Delta y}[(p^{'})^{n}_{i,j+1}-(p^{'})^{n}_{i,j}] \tag{8.3.15}$$

由 (8.3.14) 和 (8.3.15)式即可求得 $(\rho u^{'})^{n}_{i,j+\frac{1}{2}}$ 和 $(\rho^{'})^{n}_{i,j+\frac{1}{2}}$. 为简化起见, 作近似. 当解收敛时,$p^{'}\to 0$, $u^{'}\to 0$, $v^{'}\to 0$. 在方程 (8.3.14) 和 (8.3.15) 中分别令 $A^{'},B^{'}$, $(\rho u^{'})^{n}$ 和 $(\rho v^{'})^{n}$ 为零 (Patankar,1980), 则得到一种较为简单的计算校正量的格式

$$(\rho u^{\prime})^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}=-\frac{\Delta t}{\Delta x}[(p^{'})^{n}_{i+1,j}-(p^{'})^{n}_{i,j}] \tag{8.3.16}$$

$$(\rho v^{\prime})^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}=-\frac{\Delta t}{\Delta y}[(p^{'})^{n}_{i,j+1}-(p^{'})^{n}_{i,j}] \tag{8.3.17}$$

也即

$$(\rho u)^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j}=(\rho u^{*})^{n}_{i+\frac{1}{2},j}-\frac{\Delta t}{\Delta x}[(p^{'})^{n}_{i+1,j}-(p^{'})^{n}_{i,j}] \tag{8.3.18}$$

$$(\rho v)^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2}}=(\rho v^{*})^{n}_{i,j+\frac{1}{2}}-\frac{\Delta t}{\Delta y}[(p^{'})^{n}_{i,j+1}-(p^{'})^{n}_{i,j}] \tag{8.3.19}$$

也即

$$ap'_{i,j} + bp'_{i+1,j} + bp'_{i-1,j} + cp'_{i,j+1} + cp'_{i,j-1} + d = 0 \tag{8.3.21}$$

其中

$$\begin{aligned} &a = 2\left(\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2}\right), \quad b = -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}, \quad c = -\frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} \\ &d = \frac{1}{\Delta x}[(\rho u^*)_{i+\frac{1}{2},j} - (\rho u^*)_{i-\frac{1}{2},j}] + \frac{1}{\Delta y}[(\rho v^*)_{i,j+\frac{1}{2}} - (\rho v^*_{i,j-\frac{1}{2}}] \end{aligned} \tag{8.3.22}$$

方程 (8.3.21) 即是压力校正公式, 其中 d 是源项, 迭代开始时,u^* 和 v^* 不满足连续方程, 当速度场收敛于满足连续方程的场时,$d = 0$. 注意 (8.3.21)式是通过 (8.3.14) 和 (8.3.15) 中的 $A', B', (\rho u')$ 和 $(\rho v')^n$ 为零而得到的. (8.3.21)式是一个涉及五个点的格式.

§8.4 一维守恒形式方程的差分格式

考虑标量守恒律方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = 0 \tag{8.4.1}$$

其守恒差分格式的一般形式是

$$u_j^{n+1} = u_j^n - R(S_{j+\frac{1}{2}}^n - S_{j-\frac{1}{2}}^n) \tag{8.4.2}$$

其中 $R = \frac{\Delta t}{\Delta x}$. 首先介绍熵 (entropy) 或 E 差分格式.

定义 8.4.1 *差分格式 (8.4.2) 称为熵或E格式, 如果*

$$\begin{aligned} &\text{当}u_j < u_{j+1}\text{时}, \quad S_{j+\frac{1}{2}} \leqslant F(u), \quad u \in [u_j, u_{j+1}] \\ &\text{当}u_{j+1} < u_j\text{时}, \quad S_{j+\frac{1}{2}} \geqslant F(u), \quad u \in [u_{j+1}, u_j] \end{aligned} \tag{8.4.3}$$

注意条件 (8.4.4) 要对 $[u_j, u_{j+1}]$ 中的所有 u 值都满足, 若 F 是凸的, 则条件 (8.4.4) 将满足. E 格式有一个好的性质, 就是当其收敛, 其收敛解是 (8.4.1) 的弱解而且也是无粘性解.

例 1 方程 (8.4.1) 的 FTFS 格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - R(F_{j+1}^n - F_j^n) \tag{8.4.4}$$

是 E 格式, 其中 $R = \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

解 由该格式知

$$S_{j+\frac{1}{2}}^n = F_{j+1}^n = F(u_{j+1}^n)$$

由于格式要满足 CFL 条件, 故有 $-1 \leqslant RF' \leqslant 0$. 从而 $F' < 0$. 因此 F 是减函数. 于是当 $u_j < u_{j+1}$ 时

$$S(u_j, u_{j+1}) = F(u_{j+1}) \leqslant F(u), \quad u \in [u_j, u_{j+1}]$$

当 $u_{j+1} < u_j$ 时

$$S(u_j, u_{j+1}) = F(u_{j+1}) \geqslant F(u), \quad u \in [u_{j+1}, u_j]$$

因此, FTFS 格式是 E 格式.

定义 8.4.2 *差分格式*

$$u_j^{n+1} = Q(u_{j-p-1}^n, \cdots, u_{j+q}^n) \tag{8.4.5}$$

称为单调的, 如果函数 Q 关于其自变量是一个单调增加函数.

例 2 近似方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{8.4.6}$$

的 FTBS 格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - aR\delta_x^- u_j^n = u_j^n - aR(u_j^n - u_{j-1}^n)$$

是一个单调格式, 其中 $R = \dfrac{\Delta t}{\Delta x}$.

解 由

$$Q(u_{j-1}^n, u_j^n) = u_j^n - aR(u_j^n - u_{j-1}^n) = -aRu_{j-1}^n + (1 - aR)u_j^n$$

得

$$\frac{\partial Q}{\partial u_{j-1}^n} = aR, \quad \frac{\partial Q}{\partial u_j^n} = raR$$

因此当 $aR \geqslant 0$ 或 $1 - aR \geqslant 0$ 时, FTBS 格式是单调的. 由于该格式的稳定性条件是 $0 \leqslant aR \leqslant 1$, 因此, 当 $0 \leqslant aR \leqslant 1$ 时, FTBS 格式是单调的.

例 3 方程 (8.4.6) 的 Lax-Wendroff 格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{aR}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{a^2R^2}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

不是单调格式. 其中 $R = \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

证明 由

$$\begin{aligned} Q(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) &= u_j^n - \frac{aR}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{a^2R^2}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \\ &= \left(\frac{aR}{2} + \frac{a^2R^2}{2}\right)u_{j-1}^n + (1 - a^2R^2)u_j^n + \left(\frac{a^2R^2}{2} - \frac{aR}{2}\right)u_{j+1}^n \end{aligned}$$

得

$$\frac{\partial Q}{\partial u_{j-1}^n} = \frac{aR}{2} + \frac{a^2R^2}{2}, \quad \frac{\partial Q}{\partial u_j^n} = 1 - a^2R^2, \quad \frac{\partial Q}{\partial u_{j-1}^n} = -\frac{aR}{2} + \frac{a^2R^2}{2}$$

格式的单调性要求

$$
\begin{aligned}
&\frac{aR}{2}+\frac{a^2R^2}{2}\geqslant 0\Rightarrow aR=0 \text{ 或 } aR>0 \text{ 或 } aR\leqslant -1\\
&1-a^2R^2\geqslant 0\Rightarrow -1\leqslant aR\leqslant -1\\
&-\frac{aR}{2}+\frac{a^2R^2}{2}\geqslant 0\Rightarrow aR=0 \text{ 或 } aR\geqslant 1 \text{ 或 } aR<0
\end{aligned}
\tag{8.4.7}
$$

仅当 $aR=0$ 或 $aR=\pm 1$ 上面三式同时成立. 由于 Lax-Wendroff 格式的稳定性条件为 $|a|R\leqslant 1$, 所以不存在单调性的区域, 我们说 Lax-Wendroff 格式不是单调的.

例 4 考虑守恒方程 (8.4.1) 的 Lax-Friedrichs 格式

$$
u_j^{n+1}-\frac{1}{2}(u_{j-1}^n+u_{j+1}^n)-\frac{R}{2}(F_{j+1}^n-F_{j-1}^n)
$$

的单调性.

解 由

$$
Q(u_{j-1}^n,u_j^n,u_{j+1}^n)=\frac{1}{2}(u_{j-1}^n+u_{j+1}^n)-\frac{R}{2}(F_{j+1}^n-F_{j-1}^n)
$$

得

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial Q}{\partial u_{j-1}^n}&=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}RF'(u_{j-1}^n)\\
\frac{\partial Q}{\partial u_j^n}&=0\\
\frac{\partial Q}{\partial u_{j+1}^n}&=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}RF'(u_{j+1}^n)
\end{aligned}
$$

由于 Lax-Wendroff 格式的 CFL 条件是 $|R|F'\leqslant 1$, 因此 $1\pm RF'(u_{j\pm 1}^n)\geqslant 0$. 因此 Lax-Wendroff 格式是一个单调格式.

定义 8.4.3 一个差分格式称为总变差减少 (TVD) 格式, 如果该格式的解对所有的 $n\geqslant 0$ 都有

$$
TV(\boldsymbol{u}^{n+1})\leqslant TV(\boldsymbol{u}^n) \tag{8.4.8}
$$

其中 $TV(\boldsymbol{u})$ 为网格函数的总变差, 定义为

$$
TV(\boldsymbol{u})=\sum_{j=-\infty}^{+\infty}|\delta_x^+u_j|=\sum_{j=-\infty}^{+\infty}|u_{j+1}-u_j| \tag{8.4.9}
$$

例 5 一维波动方程

$$
\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0\quad (a>0)
$$

的 FTBS 格式

$$
u_j^{n+1}=u_j^n-aR(u_j^n-u_{j-1}^n)
$$

是一个 TVD 格式. 其中

证明 注意格式的稳定性条件是 $0 \leqslant aR \leqslant 1$. 又

$$
\begin{aligned}
TV(\boldsymbol{u}^{n+1}) &= \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta^+ u_j^{n+1}| \\
&= \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u_j^n - aR\delta_x^+(u_j^n - u_{j-1}^n)| \\
&= \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |(1-aR)\delta_x^+ + u_j^n + aRu_{j-1}^n| \\
&\leqslant (1-aR)\sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u_j^n| + aR\sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u_{j-1}^n| \\
&= \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u_j^n| = TV(\boldsymbol{u}^n)
\end{aligned}
\tag{8.4.10}
$$

其中 δ_x^+ 和 δ_x^0 分别为一阶前差和后差算子. 因此, FTBS 格式是一个 TVD 格式.

定义 8.4.4 一个差分格式称为本性无振荡 (ENO) 格式, 如果对所有的 $n \geqslant 0$ 和某个 p 都有

$$
TV(\boldsymbol{u}^{n+1}) \leqslant TV(\boldsymbol{u}^n) + O(\Delta x^p) \tag{8.4.11}
$$

定义 8.4.5 形如

$$
u_j^{n+1} = u_j^n + C_{j+\frac{1}{2}}^n \delta_x^+ u_j^n - D_{j-\frac{1}{2}}^n \delta_x^- u_j^n \tag{8.4.12}
$$

的差分格式称为增量 (incremental) 型或 I 型格式, 其中 $C_{j-\frac{1}{2}}^n$ 和 $D_{j-\frac{1}{2}}^n$ 依赖于 u_j^n 及其相邻的值.

假定有一个增量型格式, 则该格式可以写成守恒形式, 对应的数值通量函数可以写成

$$
S_{j+\frac{1}{2}}^n = F(u_j^n) - \frac{1}{R}C_{j+\frac{1}{2}}^n \delta_x^+ u_j^n = F(u_{j+1}^n) \quad \frac{1}{R}D_{j+\frac{1}{2}}^n \delta_x^+ u_j^n \tag{8.4.13}
$$

另一方面, 若给定一个差分格式的数值通量函数 S, 则可以写成增量型格式, 其中 C 和 D 为

$$
C_{j+\frac{1}{2}}^n = -R\frac{S_{j+\frac{1}{2}}^n - F(u_j^n)}{\delta_x^+ u_j^n} \tag{8.4.14}
$$

$$
D_{j+\frac{1}{2}}^n = -R\frac{S_{j+\frac{1}{2}}^n - F(u_{j+1}^n)}{\delta_x^+ u_j^n} \tag{8.4.15}
$$

下面给出一个 TVD 格式的充分条件.

命题 8.4.1 考虑形如 (8.4.16) 的 I 型格式即

$$
\begin{aligned}
u_j^{n+1} &= u_j^n + C_{j+\frac{1}{2}}^n \delta_x^+ u_j^n - D_{j-\frac{1}{2}}^n \delta_x^- u_j^n \\
&= u_j^n + C_{j+\frac{1}{2}}^n (u_{j+1}^n - u_j^n) - D_{j-\frac{1}{2}}^n (u_j^n - u_{j-1}^n)
\end{aligned}
\tag{8.4.16}
$$

若

$$C^n_{j+\frac{1}{2}} \geqslant 0, \quad D^n_{j+\frac{1}{2}} \geqslant 0, \quad C^n_{j+\frac{1}{2}} + D^n_{j+\frac{1}{2}} \leqslant 0 \tag{8.4.17}$$

则该格式是一个 TVD 格式.

证明 注意到关系式

$$\delta_x^- u^n_{j+1} = \delta_x^+ u^n_j, \qquad \delta_x^- u^n_j = \delta_x^+ u^n_{j-1}$$

由 I 型格式 (8.4.16) 式计算网格函数 u 的总变差, 即

$$\begin{aligned}
& TV(u^{n+1}) \\
= & \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u^{n+1}_j| = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u^n_j + \delta_x^+ (C^n_{j+\frac{1}{2}} \delta_x^+ C^n_j) - \delta^+ (D^n_{j-\frac{1}{2}} \delta^- u^n_j)| \\
= & \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u^n_j + C^n_{j+\frac{3}{2}} \delta_x^+ u^n_{j+1} - C^n_{j+\frac{1}{2}} \delta_x^+ u^n_j - D^n_{j+\frac{1}{2}} \delta_x^- u^n_{j+1} + D^n_{j-\frac{1}{2}} \delta_x^- u^n_j| \\
= & \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u^n_j + C^n_{j+\frac{3}{2}} \delta_x^+ u^n_{j+1} - C^n_{j+\frac{1}{2}} \delta_x^+ u^n_j - D^n_{j+\frac{1}{2}} \delta_x^+ u^n_j + D^n_{j-\frac{1}{2}} \delta_x^+ u^n_{j-1}| \\
\leqslant & \sum_{j=-\infty}^{+\infty} C^n_{j+\frac{3}{2}} |\delta_x^+ u^n_{j+1}| + \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (1 - C^n_{j+\frac{1}{2}} - D^n_{j+\frac{1}{2}}) |\delta_x^+ u^n_j| + \sum_{j=-\infty}^{+\infty} D^n_{j-\frac{1}{2}} |\delta_x^+ u^n_{j-1}| \\
= & \sum_{j=-\infty}^{+\infty} C^n_{j+\frac{1}{2}} |\delta_x^+ u^n_j| + \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (1 - C^n_{j+\frac{1}{2}} - D^n_{j+\frac{1}{2}}) |\delta_x^+ u^n_j| + \sum_{j=-\infty}^{+\infty} D^n_{j+\frac{1}{2}} |\delta_x^+ u^n_{j-1}| \\
= & \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta_x^+ u^n_j| = TV(u^n)
\end{aligned}$$

即当条件 (8.4.17) 满足时, I 型格式 (8.4.16) 是一个 TVD 格式.

□

例6 近似方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad a > 0$$

的 FTFS 格式

$$u^{n+1}_j = u^n_j - aR(u^n_{j+1} - u^n_j) = u^n_j - aR\delta^+ u^n_j$$

是一个 TVD 格式, 其中 $R = \dfrac{\Delta t}{\Delta x}$.

证 因为

$$C^n_{j+\frac{1}{2}} = -aR, \quad D^n_{j+\frac{1}{2}} = 0$$

于是由条件 (8.4.26) 可知, 当 $-1 \leq aR < 0$ 时, 该格式是一个 TVD 格式. 该格式的稳定性条件也为 $-1 \leq aR < 0$.

命题8.4.2 满足条件

$$R\left|(S^n_{j+\frac{1}{2}} - F^n_j) + (S^n_{j+\frac{1}{2}} - F^n_{j+1})\right| \leq |\delta^n u^n_j|$$

的守恒 E 格式是 TVD 格式.

证明 考虑守恒的 E 格式 (8.4.2). 可将该 E 格式写成 I 型格式, 其中 $C^n_{j+\frac{1}{2}}$ 和 $D^n_{j+\frac{1}{2}}$ 分别由 (8.4.15) 和 (8.4.15) 式给出, 即

$$C^n_{j+\frac{1}{2}} = -R\frac{S^n_{j+\frac{1}{2}} - F(u^n_j)}{\delta^+_x u^n_j}, \quad D^n_{j+\frac{1}{2}} = -R\frac{S^n_{j+\frac{1}{2}} - F(u^n_{j+1})}{\delta^+_x u^n_j}$$

若 $u^n_j < u^n_{j+1}$, 因是 E 格式, 是

$$S^n_{j+\frac{1}{2}} \le F(u^n_j) \Longrightarrow C^n_{j+\frac{1}{2}} \ge 0$$
$$S^n_{j+\frac{1}{2}} \le F(u^n_{j+1}) \Longrightarrow D^n_{j+\frac{1}{2}} \ge 0$$

同时, 若 $u^n_{j+1} < u^n_j$, 有

$$S^n_{j+\frac{1}{2}} \ge F(u^n_j) \Longrightarrow C^n_{j+\frac{1}{2}} \ge 0$$
$$S^n_{j+\frac{1}{2}} \ge F(u^n_{j+1}) \Longrightarrow D^n_{j+\frac{1}{2}} \ge 0$$

又因为

$$\begin{aligned} C^n_{j+\frac{1}{2}} + D^n_{j+\frac{1}{2}} &= -R\frac{C^n_{j+\frac{1}{1}2} - F^n_j}{\delta^+_x u^n_j} - -R\frac{C^n_{j+\frac{1}{1}2} - F^n_{j+1}}{\delta^+_x u^n_j} \\ &= R\left|\frac{C^n_{j+\frac{1}{1}2} - F^n_j}{\delta^+_x u^n_j} + \frac{C^n_{j+\frac{1}{1}2} - F^n_{j+1}}{\delta^+_x u^n_j}\right| \end{aligned} \tag{8.4.18}$$

故满足条件 (8.4.26), 是 TVD 格式. 命题得证.

命题8.4.3 线性 TVD 差分格式至多是一阶精度.

证明 考虑如下形式的差分格式

$$u^{n+1}_j = \sum_{k=-q}^{p} q_j u^n_{j+k} \tag{8.4.19}$$

和函数

$$u^n_j = \begin{cases} 1 & k \le 0 \\ 0 & k > 0 \end{cases}$$

于是

$$TV(\boldsymbol{u}^n) = 1$$
$$TV(\boldsymbol{u}^{n+1}) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} |\delta^+_x u^{n+1}_j| = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \left|\sum_{k=-q}^{p} a_j \delta^+_x u^n_{j+k}\right| = \sum_{j=-q}^{p} |a_j|$$

差分格式 (8.4.30) 相容的条件是

$$\sum_{k=-q}^{+p} a_k = 1$$

因此若对某 $a, a_k < 0$, 则

$$TV(\boldsymbol{u}^{n+1}) = \sum_{k=-q}^{p} |a_k| > 1 = TV(\boldsymbol{u}^n)$$

该格式不是 TVD 格式, 因此, 对所有 $-q \leq k \leq p$, 必有 $a_k \geq 0$. 该格式是单调的, 而单调守恒格式是 TVD 格式. 矛盾.

下面介绍另一种单调 E 格式即 **Godunov 格式**. Godunov 格式是用分片线性常数函数来近似初始条件, 然后在小的时间间隔上求解局部 Riemann 问题. 设 u_j^n 是守恒方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = 0, \quad x \in \mathbf{R}, \quad t > 0 \tag{8.4.20}$$

的数值解. 其中初始条件是

$$u(x,0) = f(x) \quad x \in \mathbf{R} \tag{8.4.21}$$

现用 u_j^n 来定义一个分片线性函数 $\bar{u}(x, t_n)$

$$\bar{u}(x,t_n) = \begin{cases} u_{j-1}^n & x_{j-\frac{3}{2}} \leqslant x_{j-\frac{1}{2}} \\ u_j^n & x_{j-\frac{1}{2}} \leqslant x_{j+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{8.4.22}$$

然后以 $\bar{u}(x, t_n)$ 为初始数据, 精确求解如下的局部 Riemann 问题

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial F(\bar{u})}{\partial x} = 0, \quad x \in R, \ t > t_n \tag{8.4.23}$$

$$\bar{u}(x,t_n) = \begin{cases} \bar{u}_{j-1}^n & x_{j-\frac{3}{2}} \leqslant x_{j-\frac{1}{2}} \\ \bar{u}_j^n & x_{j-\frac{1}{2}} \leqslant x < x_{j+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{8.4.24}$$

以得到 $t_n \leqslant t_{n+1}$ 的 $\bar{u}(x,t)$ 值. 由于初始数据是分片常数, 因此, 该局部 Riemann 问题在一个短时间内可以精确求解. 在得到 $[t_n, t_{n+1}]$ 区间上得精确值后, 定义近似解

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \bar{u}^n(x, t_{n+1}) dx \tag{8.4.25}$$

然后再由 u_j^{n+1} 定义新得分片常数函数 $\bar{u}^{n+1}(x, t_{n+1})$. 一直重复该过程.

实际上, 单元积分 (8.4.25) 不用具体计算, 可以基于守恒的积分形式来得到 u_j^{n+1}. 对 (8.4.23) 在 $[x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$ 上关于 x 积分, 在 $[t_n, t_{n+1}]$ 上关于 t 积分, 得到

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \bar{u}(x,t_{n+1}) - \bar{u}(x,t_n)]\mathrm{d}x + \int_{t_j}^{t_{j+1}} [F(\bar{u}(x_{j+\frac{1}{2}},t)) - F(\bar{u}(x_{j-\frac{1}{2}},t))]dt = 0 \tag{8.4.26}$$

上式两端乘以 $\frac{1}{\Delta x}$, 利用 (8.4.25), 可将 (8.4.26) 化为

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{\Delta x} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [F(\bar{u}(x_{j+\frac{1}{2}},t)) - F(\bar{u}(x_{j-\frac{1}{2}},t))]\mathrm{d}t \tag{8.4.27}$$

定义数值通量函数

$$S^n_{j\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t}\int_{t_j}^{t_{j+1}} F(\bar{u}(x_{j\pm\frac{1}{2}}, t))\mathrm{d}t \tag{8.4.28}$$

则 (8.4.27) 可写成

$$u_j^{n+1} = u_j^n - R[S^n_{j+\frac{1}{2}} - S^n_{j-\frac{1}{2}}] \tag{8.4.29}$$

这就是 **Godunov** 格式, 其中 $R = \frac{\Delta t}{\Delta x}$. 注意 Godunov 格式 (8.4.29) 是守恒格式.

§8.5 高分辨率格式

本节推导标量守恒格式的高分辨率格式. 高分辨率格式通常都是二阶精度 (或更高阶精度), 无振荡, 能够精确求解解中的不连续性, 从前面的讨论知道, 高分辨率格式一定是一个非线性格式. 下面介绍两类高分辨率格式的算法, 即通量限制器法, 斜率限制器法.

§8.5.1 通量限制器法

该方法依据前面格式的数值通量函数来定义新格式的数值通量函数. 特别地, 将格式的数值通量函数写成

$$S^n_{j+\frac{1}{2}} = L^n_{j+\frac{1}{2}} + \phi_j^n[H^n_{j+\frac{1}{2}} - L^n_{j+\frac{1}{2}}] \tag{8.5.1}$$

或

$$S^n_{j+\frac{1}{2}} = H^n_{j+\frac{1}{2}} - (1-\phi_j^n)[H^n_{j+\frac{1}{2}} - L^n_{j+\frac{1}{2}}] \tag{8.5.2}$$

其中 L 和 H 分别是低阶格式和高阶格式的数值通量函数, 系数 ϕ_j^n 待定. 基本思想是新格式中的数值通量函数有低阶格式光滑的性质, 且有可能具有高阶格式的精度. 因此, 在解的光滑部分将 ϕ_j^n 定义成 1, 这时, $S^n_{j+\frac{1}{2}} \approx H^n_{j+\frac{1}{2}}$; 而在解的不连续或梯度大的部分, 将 ϕ_j^n 定义成 0, 这时, $S^n_{j+\frac{1}{2}} \approx L^n_{j+\frac{1}{2}}$.

为简单起见, 考虑线性双曲型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad a > 0 \tag{8.5.3}$$

求解该方程的 Lax-Wendroff 格式的数值通量函数是

$$S^n_{j+\frac{1}{2}} = au_j^n + \frac{1}{2}a(1-aR)\delta_x^+ u_j^n \tag{8.5.4}$$

该格式可以写成

$$S = L + H \tag{8.5.5}$$

其中

$$L^n_{j+\frac{1}{2}} = au_j^n \tag{8.5.6}$$

$$H_{j+\frac{1}{2}}^n = au_j^n + \frac{1}{2}a(1-aR)\delta_x^+ u_j^n \tag{8.5.7}$$

易知, (8.5.6) 式 $L_{j+\frac{1}{2}}^n$ 即是一阶精度左偏心 (FTBS) 格式的数值通量函数, (8.5.7) 式 $H_{j+\frac{1}{2}}^n$ 即是 Lax-Wendroff 格式的数值通量函数. 为构造高分辨率格式, 现将 (8.5.6) 式替换成

$$\begin{aligned} S_{j+\frac{1}{2}}^n &= L_{j+\frac{1}{2}}^n + \phi_j^n (H_{j+\frac{1}{2}}^n - L_{j+\frac{1}{2}}^n) \\ &= au_j^n + \phi_j^n \frac{1}{2} a(1-aR)\delta_x^+ u_j^n \end{aligned} \tag{8.5.8}$$

函数 ϕ_j^n 称为**通量限制器**, 选为非负以保持反扩散通量的符号. 一个常用方法取 $\phi_j^n = \phi(\theta_j^n)$, 其中 θ_j^n 定义为

$$\theta_j^n = \frac{\delta_x^- u_j^n}{\delta_x^+ u_j^n} \tag{8.5.9}$$

用来度量解的光滑程度, 称为**光滑参数**. 当解 u_j^n 变化不大时, θ_j^n 接近 1. 考虑的差分格式为 (8.5.8) 式, 得到

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n - R(S_{j+\frac{1}{2}}^n - S_{j-\frac{1}{2}}^n) \\ &= u_j^n - aR\delta_x^- u_j^n - \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi_j^n \delta_x^+ u_j^n \\ &\quad + \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi_{j-1}^n \delta_x^+ u_{j-1}^n \\ &= u_j^n - aR\delta_x^- u_j^n - \frac{1}{2}aR(1-aR)\delta_x^-(\phi_j^n \delta_x^+ u_j^n) \end{aligned} \tag{8.5.10}$$

在 (8.5.10) 式中, ϕ 的不同选择将得到不同的差分格式, $\phi = 0$ 即为左偏心 (FTBS) 格式, $\phi = 1$ 即为 Lax-Wendroff 格式, $\phi = 0$ 则可得 Beam-Warming 格式.

下面讨论如何选择 ϕ. 将 (8.5.10) 式改写成 I 型格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \left[aR - \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi_{j-1}^n + \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi_j^n \frac{\delta_x^+ u_j^n}{\delta_x^- u_j^n}\right]\delta_x^- u_j^n \tag{8.5.11}$$

于是

$$C_{j+\frac{1}{2}}^n = 0 \tag{8.5.12}$$

$$D_{j-\frac{1}{2}}^n = aR - \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi_{j-1}^n + \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi_j^n \frac{\delta_x^+ u_j^n}{\delta_x^- u_j^n} \tag{8.5.13}$$

由命题 8.4.1 知, 当 (8.5.13) 式满足

$$0 \leqslant D_{j-\frac{1}{2}}^n \leqslant 1 \tag{8.5.14}$$

于是

$$C^n_{j+\frac{1}{2}} = 0 \tag{8.5.12}$$

$$D^n_{j-\frac{1}{2}} = aR - \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi^n_{j-1} + \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi^n_j \frac{\delta^+_x u^n_j}{\delta^-_x u^n_j} \tag{8.5.13}$$

由命题 8.4.1 知, 当 (8.5.13) 式满足

$$0 \leqslant D^n_{j-\frac{1}{2}} \leqslant 1 \tag{8.5.14}$$

时, 格式 (8.5.11) 即为 TVD 格式. 将 (8.5.13) 式改写成

$$D^n_{j-\frac{1}{2}} = aR - \frac{1}{2}aR(1-aR)\phi(\theta^n_{j-1}) + \frac{1}{2}aR(1-aR)\frac{\phi(\theta^n_j)}{\theta^n_j} \tag{8.5.15}$$

$$= aR - \frac{1}{2}aR(1-aR)\left[\phi(\theta^n_{j-1}) - \frac{\phi(\theta^n_j)}{\theta^n_j}\right] \tag{8.5.16}$$

若 ϕ 满足

$$\left|\frac{\phi(\theta_j)}{\theta_j} - \phi(\theta_{j-1})\right| \leqslant 2 \tag{8.5.17}$$

则 (8.2.15) 式满足 (注意 CFL 条件要求 $0 \leqslant aR \leqslant 1$).

当 $\theta \leqslant 0$ 时, 不等式 (8.5.17) 可用来选择限制器函数 ϕ, 另外要求 ϕ 非负, 并假定 $\phi(\theta) = 0$. 可以证明, 若 ϕ 满足

$$0 \leqslant \frac{\phi(\theta)}{\theta} \leqslant 2, \quad 0 \leqslant \phi(\theta) \leqslant 2 \tag{8.5.18}$$

则 (8.5.17) 式满足, 从而是 TVD 格式. 由 (8.5.18) 所确定的图形如图 8.1 中的阴影部分所示. 显然有很多函数可以落在阴影区域中, 下面的命题给出了差分格式 (8.5.10) 的一般性质.

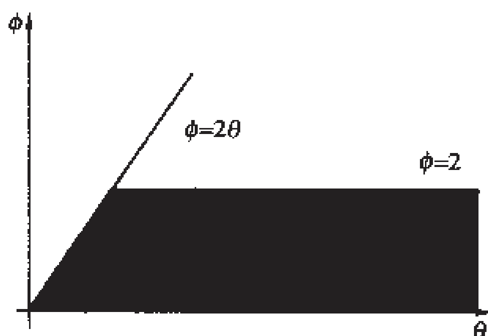


图 8.2 限制器函数 ϕ 示意图

命题 8.5.1 (1) 假如通量限制函数有界, 则差分格式 (8.5.10) 与方程 (8.2.3) 相容. (2) 若 $\phi(1) = 1$, 且 ϕ 在 $\theta = 1$ 处 Lipschitz 连续, 则差分格式 (8.5.10) 具有二阶精度.

由该命题可知, 二阶精度格式的限制器 ϕ 经过点 $(1,1)$. 例如 Lax-Wendroff 格式的 $\phi=1$ 和 Beam-Warming 格式的 $\phi(\theta)=\theta$ 都经过 $(1,1)$, 所以都具有二阶精度, 但他们不完全包含在图 8.1 的阴影区域中, 故不是 TVD 格式, 下面是一些典型的限制器的选择.

(1) Superbee 限制器

$$\phi(\theta)=\max\{0,\min[1,2\theta],\min[0,2]\}$$

(2) Van Lee 限制器

$$\phi(\theta)=\frac{|\theta|+\theta}{1+|\theta|}$$

(3) C-O 限制器

$$\phi(\theta)=\{0,\min[\theta,\psi]\},\quad 1\leqslant\psi\leqslant 2$$

(4) BW-LW 限制器

$$\phi(\theta)=\max\{0,\min[\theta,1]\}$$

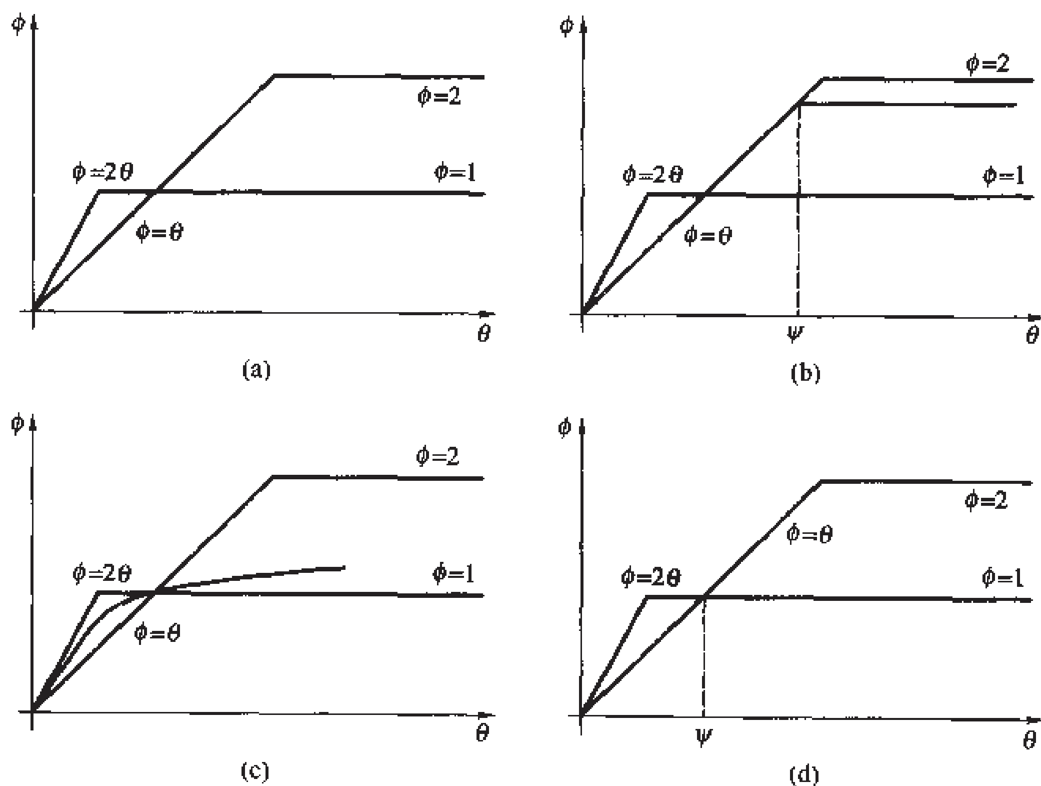


图 8.3 四种限制器函数 ϕ 的示意图

易知, 解 $\bar{u}(x,t_{n+1})$ 可表示为

$$u(x,t_{n+1}) = v_0^n(x-at) = \begin{cases} u_{j-1}^n + \sigma_{j-1}^n(x-a\Delta t - x_{j-1}) & x_{j-\frac{3}{2}} \leqslant x - at \leqslant x_{j-\frac{1}{2}} \\ u_j^n + \sigma_j^n(x - a\Delta t - x_j) & x_{j-\frac{1}{2}} \leqslant x - at \leqslant x_{j+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{8.5.21}$$

于是 u_j^{n+1} 可近似为

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} v_0^n(x-at)dx \\ &= \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}+a\Delta t}[u_{j-1}^n + \sigma_{j-1}^n(x-a\Delta t - x_{j-1})]dx \\ &\quad + \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}+a\Delta t}^{x_{j+\frac{1}{2}}}[u_{j-1}^n + \sigma_j^n(x - a\Delta t - x_j)]dx \end{aligned} \tag{8.5.22}$$

经积分计算得

$$u_j^{n+1} = u_j^n - aR\delta_x^- u_j^n - \frac{aR}{2}(1-aR)\Delta x \delta_x^- \sigma_j^n \tag{8.5.23}$$

若取 $\sigma_j^n = \dfrac{\delta_x^+ u_j^n}{\Delta x}$ 即为 Lax-Wendroff 格式. 为了获得 TVD 格式, 必须对斜率 σ_j^n 作限制, 因此称为**斜率限制器方法**. 一个简单的斜率限制器是

$$\sigma_j^n = \frac{1}{\Delta x}\min mod(\delta_x^+ u_j^n, \delta_x^- u_j^n) \tag{8.5.24}$$

其中 $\min mod$ 函数定义为

$$\min mod(a,b) = \begin{cases} a & \text{当}|a| < |b|\text{且}ab > 0\text{时} \\ b & \text{当}|a| > |b|\text{且}ab > 0\text{时} \\ 0 & \text{当}ab \leqslant 0\text{时} \end{cases} \tag{8.5.25}$$

§8.6 守恒形式方程的矢通量分裂法

守恒形式的 Navier-Stokes 方程由 (8.1.32) 给出, 即

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} + \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial y} + \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial z} = \boldsymbol{J} \tag{8.6.1}$$

其中 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{F},\boldsymbol{G},\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 是关于通量变量的列向量. 通量向量 $\boldsymbol{F},\boldsymbol{G},\boldsymbol{H}$ 可表示为 $\boldsymbol{U}$ 的函数,$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})$, $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{G}(\boldsymbol{U})$ 和 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{U})$, 由于这些关系通常为非线性函数, 因此方程 (8.6.1) 是非线性的. (8.6.1) 可以写成

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{U}}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} + \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{U}}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial y} + \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \boldsymbol{U}}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial z} = \boldsymbol{J} \tag{8.6.2}$$

其中 $\dfrac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{U}}, \dfrac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{U}}, \dfrac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \boldsymbol{U}}$ 分别称为通量向量 $\boldsymbol{F}, \boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的 Jacobi 行列式矩阵. 记

$$A \equiv \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{U}}, \quad B \equiv \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{U}}, \quad C \equiv \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \boldsymbol{U}} \tag{8.6.3}$$

则 (8.6.1) 式可写成

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + A\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} + B\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial y} + C\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial z} = \boldsymbol{J} \tag{8.6.4}$$

该方程是 $\boldsymbol{U}$ 的线性形式, 是一个拟线性方程, 方程的性质由 Jacobi 矩阵 A, B, C 的特征表示. 对没有体力的一维非定常无粘性流, 守恒形式的方程为

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} = 0 \tag{8.6.5}$$

其中

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix} \tag{8.6.6}$$

$$\boldsymbol{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u E + pu \end{bmatrix} \tag{8.6.7}$$

这里 E 表示每单位质量的总能量, 即 $E = e + \dfrac{V^2}{2}$.

对理想气体, 定体比热容 $c_v = R/(\gamma - 1)$, $e = c_v T$, $R = 8.31\mathrm{J} \cdot \mathrm{K}^{-1} \cdot \mathrm{mol}^{-1}$ 为气体常数, T 为温度; 状态方程为 $p = \rho R T$, 于是

$$p = (\gamma - 1)\frac{R}{\gamma - 1}\rho T = (\gamma - 1)\rho c_v T = (\gamma - 1)\rho e \tag{8.6.8}$$

由这些关系式, 可导出非定常一维流拟线性守恒形式的方程, 为

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + A\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} = 0 \tag{8.6.9}$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 即 (8.6.6) 式, Jacobi 矩阵 A 为

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ (\gamma - 3)\frac{u^2}{2} & (3 - \gamma)u & \gamma - 1 \\ (\gamma - 1)u^3 - \gamma u E & -\frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 + \gamma E & \gamma u \end{bmatrix} \tag{8.6.10}$$

矩阵 A 有三个互不相同的实特征值, 分别为 $u, u + c, u - c$, 其中 c 为音速, 故方程组是双曲型的. Jacobi 矩阵的特征值给出了场流动或传播的方向.

1979 年 Steger 和 Qarming 提出的矢通量分裂法, 是一种求解守恒型双曲型方程组的方法, 现仍以一维守恒型的双曲型方程式组 (8.6.5) 为例说明. 考虑与 (8.6.5)

对应的拟成性方程组 (8.6.9), 因 Jacobi 矩阵 A 即 (8.6.10) 有三个互不相同的特征值即 $\lambda_1 = u$, $\lambda_2 = u + c$, $\lambda_3 = u - c$, 所以方程组 (8.6.9) 是双曲型的, 从而存在矩阵 P, 使矩阵 A 对角化, 对角矩阵的元素为特征值, 即有

$$P^{-1}AP = \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} \tag{8.6.11}$$

定义

$$\Lambda^{+} = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Lambda^{+} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u-c \end{bmatrix} \tag{8.6.12}$$

及

$$A^{+} = P\Lambda^{+}P^{-1}, \quad A^{-} = P\Lambda^{-}P^{-1} \tag{8.6.13}$$

由 (8.6.7) 式知, 矢通量 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})$ 是 $\boldsymbol{U}$ 的一阶齐次函数, A 是 $\boldsymbol{F}$ 的 Jacobi 矩阵, 故在 $\boldsymbol{F}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 之间有关系

$$\boldsymbol{F} = A\boldsymbol{U} \tag{8.6.14}$$

从而可将矢通量 F 分成两部分

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{+} + \boldsymbol{F}^{-} \tag{8.6.15}$$

其中 $\boldsymbol{F}^{+}$ 与矩阵 A 的正特征值相联系, $\boldsymbol{F}^{-}$ 与 A 的负特征值相联系. 实际由 (8.6.14) 式可知

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}^{+} &= A^{+}\boldsymbol{U} = P\Lambda^{+}P^{-1}\boldsymbol{U} \\ \boldsymbol{F}^{-} &= A\ \ \boldsymbol{U} = P\Lambda^{-}P^{-1}\boldsymbol{U} \end{aligned} \tag{8.6.16}$$

从而方程组 (8.6.5) 可写成

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}^{+}}{\partial x} + \frac{\partial \boldsymbol{F}^{-}}{\partial x} = 0 \tag{8.6.17}$$

矢通量分裂格式要求: 相应于 $\boldsymbol{F}^{+}$, 通量沿正 x 向从左向右传播, 空间导数 $\frac{\partial \boldsymbol{F}^{+}}{\partial x}$ 用向后差分格式近似; 相应于 $\boldsymbol{F}^{-}$, 通量沿负 x 向从右向左传播, 空间导数 $\frac{\partial \boldsymbol{F}^{-}}{\partial x}$ 用向前差分格式近似. 因此, 矢通量差分格式是一类迎风格式. 下面给出几种矢通量差分格式.

1. 显式格式

$$\boldsymbol{U}_i^{n+1} = \boldsymbol{U}_i^n - \Delta t \frac{(\boldsymbol{F}_i^{+})^n - (\boldsymbol{F}_{i-1}^{+})^n}{\Delta x} - \Delta t \frac{(\boldsymbol{F}_{i+1}^{-})^n - (\boldsymbol{F}_i^{-})^n}{\Delta x} \tag{8.6.18}$$

这是一个时间和空间均为一阶精度的格式, 稳定性条件是 $|\lambda_i^{\pm}|\frac{\Delta t}{\Delta x} \leqslant 1$. 其中 $\lambda_i^{\pm}$ 分别表示对角矩阵 Λ^+ 和 Λ^- 的对角元.

2. MacCormack 格式

MacComack 是空间二阶精度时间一阶精度的显式格式, 分两步完成. 用于矢通量分裂格式, 为

$$\bar{U}_j^{n+1} = \boldsymbol{U}_j^n - \Delta t\left(\frac{(\boldsymbol{F}_j^+)^n - (\boldsymbol{F}_{j-1}^+)^n}{\Delta x}\right) - \Delta t\left(\frac{(\boldsymbol{F}_{j+1}^-)^n - (\boldsymbol{F}_j^-)^n}{\Delta x}\right) \tag{8.6.19}$$

$$\boldsymbol{U}_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{U}_j^n + \bar{\boldsymbol{U}}_j^{n+1}) - \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{(\bar{\boldsymbol{F}}_j^+)^n - (\bar{\boldsymbol{F}}_{j-1}^+)^n}{\Delta x} - \frac{(\bar{\boldsymbol{F}}_{j+1}^-)^n - (\bar{\boldsymbol{F}}_j^-)^n}{\Delta x}\right) \tag{8.6.20}$$

3. 隐式格式

$$\begin{aligned}&\left[I + \frac{\theta\Delta t}{1+\xi}\left(\frac{(A_j^+)^n - (A_{j-1}^+)^n}{\Delta x} + \frac{(A_{j+1}^-)^n - (A_j^+)^n}{\Delta x}\right)\right]\Delta\boldsymbol{U}_j^n \\ &= -\left(\frac{\Delta t}{1+\xi}\right)\left(\frac{(F_j^+)^n - (F_{j-1}^+)^n}{\Delta x} + \frac{(F_{j+1}^-)^n - (F_j^-)^n}{\Delta x}\right) + \frac{\xi}{1+\xi}\Delta\boldsymbol{U}_j^{n-1}\end{aligned} \tag{8.6.21}$$

其中 θ, ξ 参数, 用来控制时间导数的差分精度:

$\theta = \frac{1}{2},\ \xi = 0$　梯形公式, 时间二阶精度.

$\theta = 1,\ \xi = 0$　时间用两点的向前差分, 时间一阶精度.

$\theta = 1,\ \xi = \frac{1}{2}$　时间用三点向后差分, 时间二阶精度.

若对空间一阶导数采用三点来近似, 则 (8.6.21) 式为

$$\begin{aligned}\left[I + \frac{\theta\Delta t}{1+\xi}\delta_x^-(A_j^+)^n + \delta_x^+(A_j^+)^n\right]\Delta\boldsymbol{U}_j^n = &-\left(\frac{\Delta t}{1+\xi}\right)[\delta_x^-(\boldsymbol{F}_j^+)^n + \delta_x^+(\boldsymbol{F}_j^-)^n] \\ &+ \frac{\xi}{1+\xi}\Delta\boldsymbol{U}_j^{n-1}\end{aligned} \tag{8.6.22}$$

其中 δ_x^+ 和 δ_x^- 为空间一阶导数的三点二阶精度差分算子

$$\delta_x^+\boldsymbol{F}_j = \frac{3\boldsymbol{F}_j - 4\boldsymbol{F}_{j-1} + \boldsymbol{F}_{j-2}}{2\Delta x},\quad \delta_x^- F_j = \frac{-3\boldsymbol{F}_j + 4\boldsymbol{F}_{j+1} + \boldsymbol{F}_{j+2}}{2\Delta x} \tag{8.6.23}$$

式(8.6.21) 与 式(8.6.22) 均可用近似因子分解的方法求解, 例如对 (8.6.22) 作近似因子分解, 为

$$\begin{aligned}&\left[I + \frac{\theta\Delta t}{1+\xi}\delta_x^-(A_j^+)^n\right]\left[1 + \frac{\theta\Delta t}{1+\xi} + \delta_x^+(A_j^-)^n\right]\boldsymbol{U}_j^n \\ &= -\left(\frac{\Delta t}{1+\xi}\right)[\delta_x^-(\boldsymbol{F}_j^+)^n + \delta_x^+(\boldsymbol{F}_j^-)^n] + \frac{\xi}{1+\xi}\Delta\boldsymbol{U}_j^{n-1}\end{aligned} \tag{8.6.24}$$

分三步求解该式

$$\begin{aligned}
&\left[I+\frac{\theta\Delta t}{1+\xi}\delta_x^-(A_j^+)^n\right]\boldsymbol{U}_j^n=-\left(\frac{\Delta t}{1+\xi}\right)\left[\delta_x^-(\boldsymbol{F}_j^+)^n+\delta_x^+(\boldsymbol{F}_j^-)^n\right]+\frac{\xi}{1+\xi}\Delta\boldsymbol{U}_j^{n-1}\\
&\left[I+\frac{\theta\Delta t}{1+\xi}\delta_x^+(A_j^-)^n\right]\Delta\boldsymbol{U}_j^n=\Delta\boldsymbol{U}^*\\
&\boldsymbol{U}_j^{n+1}=\boldsymbol{U}_j^n+\Delta\boldsymbol{U}_j^n
\end{aligned}\tag{8.6.25}$$

用式 (8.6.22) 求解时, 需要解一个以 3×3 块矩阵为元的三对角矩阵, 而 式(8.6.25) 则是求解以 3 块矩阵为元的上三角或下三角矩阵.

参考文献

[1] [苏]萨马尔斯基, 安德烈耶夫 著. 武汉大学计算数学教研室译. 椭圆型方程差分法. 北京: 科学出版社, 1984.
[2] 王立秋, 魏焕彩, 周学圣 编著. 工程数值分析. 山东: 山东大学出版社, 2002.
[3] 王承尧, 王正华, 杨晓辉. 计算流体力学及其并行算法. 长沙:国防科技大学出版社, 2000.
[4] 王烈衡, 许学军 编著. 有限元方法的数学基础. 北京: 科学出版社, 2004.
[5] 冯 康. 冯康文集. 北京: 国防工业出版社. 1993.
[6] 关 冶, 陆金甫 编著. 数值分析基础. 北京: 高等教育出版社, 1998 (2004重印).
[7] 余德浩, 汤华中 编著. 微分方程数值解法. 北京: 科学出版社, 2003.
[8] 吴江航, 韩庆书 著. 计算流体力学的理论、方法及应用. 北京: 科学出版社, 1988.
[9] 李松波 著. 耗散守恒格式理论. 北京: 高等教育出版社, 1997.
[10] 李荣华, 冯果忱 编. 微分方程数值解法 (第3版). 北京: 高等教育出版社, 1996.
[11] 陆金甫, 关 冶 编著. 偏微分方程数值解法. 北京: 清华大学出版社, 2004.
[12] 陈景良, 陈向晖 著. 特殊矩阵. 北京: 清华大学出版社, 2001.
[13] 胡健伟, 汤怀民 著. 微分方程数值方法. 北京: 科学出版社, 1999.
[14] 徐长发, 李 红. 偏微分方程数值解法. 武汉: 华中理工大学, 2001.
[15] 徐树方, 高 立, 张平文 编. 数值线性代数. 北京: 北京大学出版社, 2000.
[16] 袁亚湘, 孙文瑜 著. 最优化理论与方法. 北京: 科学出版社, 2001.
[17] 曹志浩 编著. 变分迭代法. 北京: 科学出版社, 2005.
[18] A R Mitchell, D F Griffiths. The finite Difference Method in Partial Differential Equations. John Wiley & Sons Ltd. 1980.
[19] A R Mitchell, K W Morton. The Finite Difference Methods in Partial Differential Equations. John Wiley & Sons, New York. 1980.
[20] A Quarteroni, A Valli. Numerical Approximation of Partial Differential Equations.

Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 1994.

[21] A Greenbaum. Iterative Methods for Solving Linear System. Philadelphia: SIAM, 1997.

[22] C A J Fletcher. Computational Techniques for Fluid Dynamics I: Fundamental and General Techniques. Springer-Verlag Berlin Beidelberg. 1988, 1991.

[23] C A J Fletcher. Computational Techniques for Fluid Dynamics II: Specific Techniques for Different Flow Categories. Springer-Verlag Berlin Beidelberg. 1988, 1991.

[24] Gene H Golub, Charles F van Loan. Matrix Computations. John Hopkins University Press. 1996.
中译本：袁亚湘等 译. 矩阵计算. 北京: 科学出版社, 2001.

[25] G D Smith. Numerical Solution of Partial Differential Equations. Oxford University Press, 1965.

[26] G D Smith. Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods(3rd Edition). Clarendon Press, Oxford. 1978.

[27] H Lomax, T H Pulliam, D W Zingg. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germang. 2001.

[28] Jean-Jacques Chattot. Computational Aerodynamics and Fluid Dynamics. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, New York. 2002.

[29] John D, Anderson JR. Computational Fluid Dynamics: the Basics with Applications. McGraw-Hill Companyes, Inc. 1995

[30] J W Thomas. Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods. Springer-Verlag New York Inc. 1995.

[31] J W Thomas. Numerical Partial Differential Equations: Conservation laws and elliptic equations. Springer-Verlag New York Inc. 1999.

[32] Leon Lapidus, George F Pinder. Numerical solution of partial differential equations in science and engineering. John Wiley & Sons, New York. 1992.
中译本: 孙讷正, 陆祥璇, 李竞生 译. 科学和工程中的偏微分方程数值解法. 北京: 煤滩工业出版社, 1989.

[33] M K Jain. Numerical Solution of Differential Equations. John Wiley & Sons, New York, 1979

[34] Richard S Varga. Matrix Iterative Analysis. Spring-Verlag Berlin Heidelberg. 2000.

[35] R D Richtmyer, K W Morton. Difference Methods for Initial-Value Problems, 2nd Edition. Interscience. 1967.

[36] Roger A Horn, Charles R Johnson. Matrix Analysis. Cambridge University Press. 1985

[37] R J LeVeque. Numerical Methods for Conservation Laws. Birkhäuser Verlag, Basel, 1990.

[38] R A Adams. Sobolev Space. Academic Press. New York. 1975.

[39] Roger A Horn, Charles R. Johnson. Matrix Analysis. Cambridge University Press, Cambridge, England. 1986.

[40] T Meis, U Marcowitz. Numerical Solution of Parital Differential Equations. Springer-Verlag, New York. 1979.

[41] W Hackbusch. Multigrid methods and application. Springer-Verlag, Berlin. 1991.

[42] W Joppich, S Mijalković. Multigrid Methods for Process Simulation. Springer-Verlag/Wien. 1993

中译本：林群等 译. 北京: 科学出版社, 1988.

[43] Zhang Wensheng, He Qiaodeng. Pseudo-spectral forward in 2-D transversally isotropic medium. Oil Geophysical Prospecting, 33(3), 1998, (EI).

索　引